

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA AZCAPOTZALCO

POSGRADO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

SECUENCIAMIENTO Y CONTROL EN PROCESOS POR LOTE

TESIS PRESENTADA POR EDMUNDO MARTIN GRANILLO MÉNDEZ
PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

2016

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Índice general

Resumen	6
1. Introducción	7
1.1. Procesos por lote	7
1.1.1. Características de los procesos	8
1.2. Secuenciamiento en procesos por lote	10
1.3. Control de procesos	11
1.4. Estado del arte	13
1.4.1. Secuenciamiento	13
1.4.2. Control de procesos	16
1.5. Hipótesis	20
1.6. Objetivos	21
1.6.1. Objetivo general	21
1.6.2. Objetivos particulares	21
1.7. Justificación	21
1.8. Organización del trabajo	22
2. Marco Teórico General	23
2.1. Secuenciamiento	23
2.1.1. Clasificación de modelos de optimización para secuenciamiento de lotes	27
2.2. Control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC) en procesos lote	31
2.2.1. Lineal vs No lineal	32
2.3. Proceso por lote	34
2.3.1. Caso de estudio: Polimerización de estireno	34
3. Secuenciamiento de Procesos Lote	38
3.1. Secuenciamiento como problema de optimización	38

3.1.1. Planteamiento	39
3.1.2. Formulación	39
3.1.3. Simulación	42
4. Control de Reactores Lote	44
4.1. Seguimiento de trayectoria del proceso de polimerización de estireno . .	44
4.1.1. Implementación y formulación de NMPC	44
4.1.2. Planteamiento de NMPC	50
4.1.3. Simulación	50
5. Conclusiones	54
5.1. Conclusiones principales	54
5.2. Trabajo futuro	56
Bibliografía	57

Índice de figuras

1.1. Un proceso por lotes [23]	9
1.2. a) Modo de operación no simultánea de lotes, b) Modo de operación simultánea de lotes.	11
1.3. Problema general de control	12
2.1. Proceso lote con estructura compleja de trabajo [6]	24
2.2. Proceso lote con estructura secuencial [6]	25
2.3. Mapa mental del problema de secuenciamiento [6]	26
2.4. Mapa mental de modelos de optimización para secuenciamiento de plantas lote [6]	28
2.5. Conceptos diferentes para representar problemas de secuenciamiento [6]	30
2.6. Diagrama de flujo del reactor de polimerización [38]	35
3.1. Planta multiproducto	39
3.2. Diagrama de Gantt de la secuencia óptima para la planta multiproducto. 3 Unidades y 4 productos.	43
4.1. Concepto básico de NMPC [51].	47
4.2. Ilustración del NMPC [22]	49
4.3. Reactor lote. Sistema SISO	50
4.4. Simulación NMPC para conversión del 30 %	52
4.5. Simulación NMPC para conversión del 40 %	52
4.6. Simulación NMPC para conversión del 50 %	53
4.7. Simulación NMPC para conversión del 60 %	53

Índice de tablas

1.1. Grupos académicos con software para secuenciamiento por lotes [6] . .	15
1.2. Software para secuenciamiento por lotes [6]	16
2.1. Parámetros cinéticos y físicos usados para el monómero (estireno) e iniciador (BPO) [18].	37
3.1. Tiempos de procesamiento de productos (h)	40
3.2. Tiempos $C_{j,k}$ de la planta multiproducto. 3 Unidades y 4 Productos . .	42
4.1. Parámetros de simulación NMPC.	51
4.2. Cotas para I , M y u	51

Resumen

Las operaciones lote como el secado, mezclado, destilación y reacción son usadas frecuentemente en la industria química para la producción de alimentos, farmacéuticos y otros productos como los polímeros. Una característica principal de esas plantas es la producción de múltiples productos usando el mismo equipo. Por lo anterior, el secuenciamiento de esas operaciones es crucial en ese tipo de plantas.

Otro reto importante en procesos por lote es el control, debido a la inherente naturaleza no estacionaria, la no linealidad de sus modelos y complejidad dinámica.

En este trabajo se resuelven ambos problemas; secuenciamiento y control de un proceso lote de polimerización de estireno en el cual se obtienen cuatro productos.

En el primer problema se determina la secuencia de producción a detalle, los tiempos iniciales y finales de ejecución así como el tiempo total que se requiere para completar un ciclo de producción considerando que el sistema incluye tres unidades de procesamiento. Para el segundo problema se aplica la técnica de control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC) a la unidad de reacción del sistema con la cual se obtienen los perfiles de temperatura de cada producto.

Esta investigación sirve de base para la integración y solución simultánea de ambos problemas.

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo se explica una breve introducción de los temas principales que aborda el trabajo y conceptos importantes tales como: procesos lote, plantas monoproducción, multiproducción o multipropósito, operación simultánea de lotes y control de procesos. También incluye la hipótesis del trabajo, objetivos general y particulares, justificación, estado del arte y por último la organización del trabajo de tesis.

1.1. Procesos por lote

Los reactores lote y semi-lote son normalmente usados para la producción de químicos finos y otros productos específicos de alto valor. Este tipo de reactores son muy importantes en la industria, en particular en la industria de polímeros.

La operación en reactores lote y semi-lote normalmente es llevada a cabo usando procedimientos específicos los cuales están basados principalmente en reglas heurísticas y experiencia en la planta. Una de las razones por la cual la aceptación de procedimientos sistemáticos en la industria es limitada se debe a la necesidad de modelos dinámicos detallados que puedan representar el comportamiento del proceso lo más cercano posible a la realidad [37].

El procesamiento discontinuo o por lote es el modo de operación más antiguo que conoce la industria de procesos. Actualmente se ha centrado el mayor esfuerzo en la transformación de los “viejos” procesos lote en modernos procesos continuos. Existen productos para los cuales no es posible desarrollar procesos continuos confiables. En otros casos este desarrollo exige una demanda de tiempo y recursos prohibitiva. Sin embargo, muchos productos que podrían ser manufacturados en plantas continuas se procesan de hecho en plantas lote por motivos económicos. La producción por lote se lleva a cabo usualmente en equipos relativamente estandarizados que pueden ser

adaptados fácilmente y si es necesario reconfigurados para producir otros productos diferentes. Esto es particularmente útil para productos que se fabrican en pequeñas cantidades como los farmacéuticos, agroquímicos y otros químicos finos para los cuales la demanda anual puede ser satisfecha en unos pocos días o unos pocos lotes en una planta existente.

Debido a la flexibilidad de los arreglos de producción, estos procesos pueden absorber las fluctuaciones o cambios rápidos en la demanda que son características de estos productos. Otra característica de este sector es su estrecha relación con la innovación tecnológica y la habilidad para producir rápidamente cantidades comercializables de productos muy novedosos.

Los procesos por lote ofrecen una facilidad relativa para pasar de datos experimentales de escalas piloto a diseños industriales de manera más rápida y confiable. Todos estos factores han movilizado el interés por el desarrollo de técnicas eficientes para el diseño, planificación, operación y control de plantas químicas por lote [23].

1.1.1. Características de los procesos

Los procesos de la industria química pueden ser clasificados en continuos o por lote. En un proceso continuo, los materiales pasan a través de unidades especializadas de procesamiento para terminar convertidos en productos finales. Cada una de estas unidades opera en estado estacionario y realiza una función de procesamiento dedicado. Tanto los ingresos de materiales como la salida de productos son flujos continuos de materiales. Un proceso por lote, en cambio, consiste en una secuencia de etapas que deben ser realizadas en un orden definido. La culminación de esta secuencia de etapas produce una cantidad finita de producto final. Esta cantidad finita es lo que se denomina lote. Si la cantidad requerida de producto es mayor que esta cantidad, la secuencia debe ser repetida. Estos procesos son esencialmente discontinuos y los materiales se procesan por lote. En general cada unidad opera en estado no estacionario [23]. Existen dos tipos básicos de unidades en un proceso de esta naturaleza:

- Unidades por lote
- Unidades semicontinuas

Una unidad por lote consiste en un recipiente donde los materiales a procesar son cargados, sometidos a algún tipo de procesamiento y luego descargados. Es decir, básicamente son unidades en donde se contienen los materiales por cierto tiempo con alguna capacidad de procesamiento. El caso más simple lo constituyen las unidades de

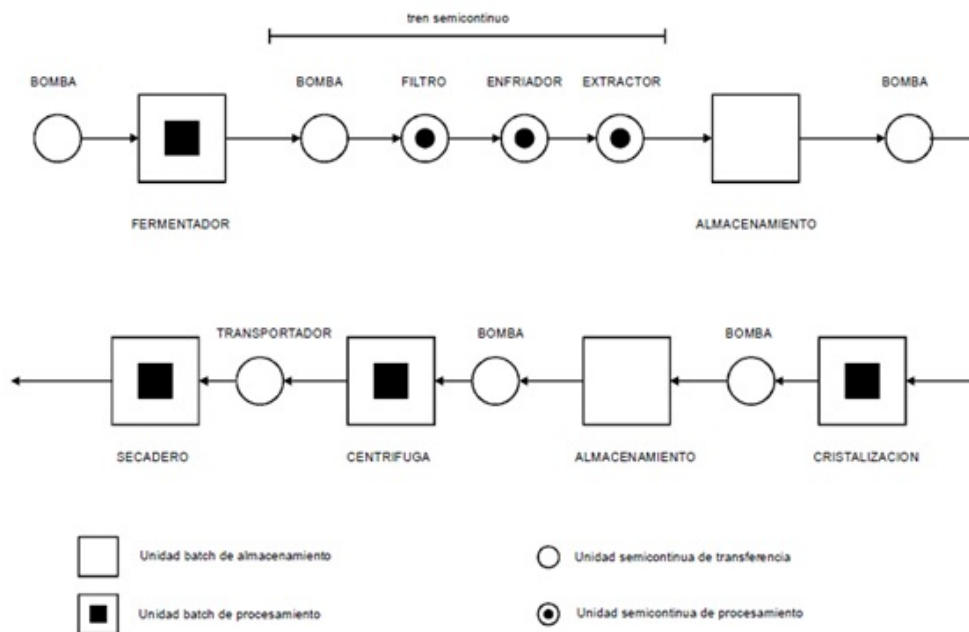


Figura 1.1: Un proceso por lotes [23]

almacenamiento donde los materiales no sufren ninguna transformación sino que son estrictamente alojados durante algún tiempo. En el otro extremo están las unidades donde varias tareas se conforman en una única unidad. Un ejemplo clásico de este tipo de unidad es el reactor agitado y enchaquetado, donde un mismo recipiente puede realizar las tareas de mezclado de reactivos, calentamiento, reacción y enfriamiento. En general, una unidad lote tendrá asociado un tiempo de procesamiento necesario para llevar a cabo la tarea.

Una unidad semicontinua es un equipo continuo que opera en forma intermitente transfiriendo el material entre dos unidades lote. Ejemplos de este tipo de unidad son las bombas y transportadores. Algunas unidades semicontinuas, además de transferir el material producen algún tipo de procesamiento. Este es el caso de filtros, mezcladores estáticos, intercambiadores de calor, centrífugas, etc. Es común también encontrar trenes de varias unidades semicontinuas en serie operando entre dos unidades lote. En la Figura 1.1 se representa un proceso lote típico donde pueden observarse los tipos de unidades mencionadas [23].

Una planta lote puede ser usada para fabricar un único producto. Estos procesos generalmente involucran el seguimiento de un procedimiento específico en la producción. Esto es, el uso de un procedimiento operativo que indique como llevar a cabo el conjunto de tareas necesarias hasta obtener el producto, así como las condiciones de

operación y tiempos de procesamiento que en su mayoría de veces son fijos [25]. Ejemplos de este tipo de plantas pueden ser encontrados en la industria farmacéutica, en la síntesis de intermediarios y algunos productos de fermentación y reciben el nombre de monoproducto. En estas plantas, la secuencia de tareas se repite una y otra vez en forma cíclica formando una campaña de producción.

1.2. Secuenciamiento en procesos por lote

Es más común todavía el uso de instalaciones por lote para la fabricación de varios productos. En este caso se pueden distinguir dos arreglos distintos: las plantas multiproducto y las plantas multipropósito. En una planta multiproducto, todos los productos siguen la misma secuencia de procesamiento a través de las mismas unidades. Su aplicación está centrada en la producción de familias de productos. Por ejemplo: producción de pinturas, polímeros de distinto grado, etc.[23]

Normalmente, estas plantas operan en campañas monoproducto, es decir, se procesan varios ciclos de un producto (una campaña), se acondicionan las unidades para el siguiente producto y se procesan varios ciclos de dicho producto, y así sucesivamente. La planta multipropósito por otra parte, consiste en una batería de unidades que son asignadas para procesar un producto determinado y una vez finalizada la producción de éste pueden ser reasignadas para otro producto en una secuencia diferente. A diferencia de las plantas multiproducto, cada producto sigue un procedimiento de fabricación diferente y en distintos momentos puede incluso ser procesado en diferentes unidades. Estas plantas son las más flexibles y su operación está basada en órdenes de producción que van definiendo los arreglos productivos.

Esto requiere un importante esfuerzo de planificación, cronogramación de tareas y asignación de recursos. Cualquiera sea el tipo de planta, toda vez que la cantidad de producto obtenido al finalizar una secuencia es insuficiente, dicha secuencia se repite cíclicamente hasta cumplimentar la cantidad requerida. La manera en que estos ciclos son conducidos da lugar a dos modos distintos. En el primer modo un lote debe ser procesado completamente antes de que el nuevo lote pueda empezar a ser procesado. Esto se conoce como operación no simultánea de lotes. En consecuencia en todo momento hay un único lote siendo procesado y por lo tanto una única etapa ocupada [23].

En el segundo modo, llamado operación simultánea de lotes, se permite que una etapa que ya está desocupada comience a operar con un nuevo lote antes que la anterior finalice su procesamiento. De esta manera habrá más de un lote procesándose y por lo tanto más de una unidad operando simultáneamente. Esta diferencia en la forma de

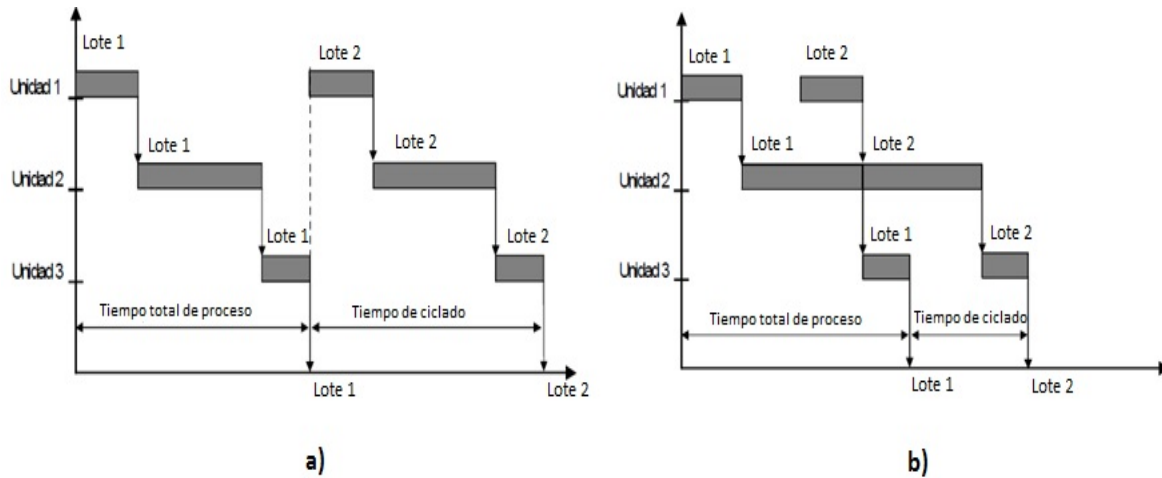


Figura 1.2: a) Modo de operación no simultánea de lotes, b) Modo de operación simultánea de lotes.

operación se ilustra en la Figura 1.2.

Como se puede apreciar en el diagrama de Gantt (Figura 1.2a) el lote 1 es procesado secuencialmente en las unidades 1, 2 y 3. El lote no. 2 comienza a procesarse en la unidad 1 sólo cuando la unidad 3 terminó de procesar el lote no. 1. Nótese que en todo momento mientras un lote está siendo procesado en una unidad, las demás unidades permanecen paradas.

En la Figura 1.2b correspondiente al modo de operación simultáneo de lotes se puede observar que el lote no. 2 comienza a procesarse en la unidad 1 mientras el lote no. 1 está siendo procesado por la unidad 2. Cuando una secuencia de operaciones se repite en forma cíclica aparece el concepto de tiempo de ciclado, que se define como el tiempo transcurrido entre la finalización de dos lotes consecutivos. Este tiempo en general será distinto del tiempo total de procesamiento de un lote, esto es, del tiempo transcurrido desde que se empieza a procesar un lote hasta que culmina su procesamiento [23].

1.3. Control de procesos

La operación de un proceso involucra la necesidad de satisfacer una serie de aspectos de carácter técnico, económico y social. En efecto, el objetivo de todo proceso es obtener un determinado producto (o un conjunto de productos), con características de calidad preespecificadas, con la mayor rentabilidad posible, y sin generar alteraciones perjudiciales para el medio ambiente y/o las personas, por lo que deben perseguirse

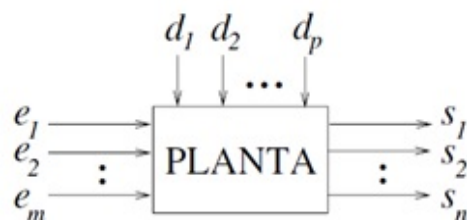


Figura 1.3: Problema general de control

varios objetivos simultáneamente [23].

El problema general de control para un sistema dado (ver Figura 1.3) consiste en lograr que las variables de salida (s_1, s_2, \dots, s_n) se comporten de una forma deseada, mediante la manipulación de una o varias variables de entrada (e_1, e_2, \dots, e_m). Es necesario manipular las entradas de una forma tal que se contraarreste o elimine el efecto de una o varias perturbaciones (d_1, d_2, \dots, d_p). Por lo común $m \geq n$ [25].

Las variables de salida son aquellas variables del proceso cuyo valor se desea o se necesita conocer a lo largo del tiempo (normalmente son las indicativas de la calidad del producto, del nivel de producción, etc.). Las variables de entrada o variables manipuladas son aquellas que pueden ser modificadas durante la operación del proceso, para que las variables de salida evolucionen según una política preestablecida. Por último, todo proceso está sometido a perturbaciones (normalmente indeseables), como por ejemplo pérdidas energéticas al medio ambiente, presencia de impurezas indeseadas en los reactivos, etc. En general, las perturbaciones son variantes en el tiempo, e interesa conocerlas para tomar acciones sobre el proceso que permitan atenuar los efectos indeseados que causan. Un proceso es (automáticamente) controlado cuando existen componentes operativos (los controladores) que permiten recibir valores deseados de consigna (o “set points”), de manera tal que las variables de salida evolucionen automáticamente hacia esos valores especificados, aun en presencia de perturbaciones externas.

El control óptimo ha despertado el interés de los sectores industrial y académico, ya que proporciona información útil para el diseño y para controlar el proceso de la reacción. En general, una solución a estos problemas implica encontrar los perfiles de tiempo que dependen de la variable de control, de manera que se optimice un índice de rendimiento en particular [46], [40].

Con base en la información anterior, considerando que el secuenciamiento y control en procesos lote ayuda a mejorar la eficiencia de los mismos, se presentan los siguientes trabajos publicados en la literatura relacionados a estos temas, cabe mencionar que el estudio del secuenciamiento se ha dado con mayor énfasis en procesos continuos, para

el caso de procesos lote sigue siendo un tema de investigación abierto.

1.4. Estado del arte

1.4.1. Secuenciamiento

El secuenciamiento es un área de investigación relativamente reciente, su estudio se ha realizado en procesos continuos como en procesos lote. En los últimos veinte años ha habido progresos importantes en esta área.

En 1997 Dessouky y Kijowski [30] presentan un modelo de programación MINLP para determinar la secuencia de lotes, tamaño de lote y tiempo de transición que satisfacen la demanda a un mínimo costo para un proceso lote multiproducto de una sola etapa con tamaño de lote fijo. El algoritmo resuelve el problema cuando los tiempos de procesamiento de todos los lotes son idénticos y los tiempos de limpieza y preparación de lote son secuencialmente independientes.

En 2006 Stankovic y Bakic [8] resuelven el problema de secuenciamiento para procesos lote usando un método de optimización basado en modelos. La ventaja de este enfoque es que permite un filtro de la calidad y de la factibilidad de las soluciones que son obtenidas.

En el mismo año Flores Tlacuahuac y Grossmann [1] propusieron una formulación simultánea de secuenciamiento y control para reactores continuos de tanque agitado (CSTR), formularon un problema de optimización dinámica mixto-entero (MIDO) que discretizaron usando colocación ortogonal sobre elementos finitos transformando así a un problema de programación no lineal mixto-entero (MINLP), esta formulación la aplicaron a 3 CSTR: (i) con una reacción irreversible, (ii) con reacciones simultáneas y múltiples entradas y (iii) con múltiples salidas.

En el mismo año Méndez y colaboradores [6], indican que existen los siguientes métodos de solución a los problemas de secuenciamiento en procesos lote:

- **Programación con restricciones (CP).** Métodos de satisfacción de restricciones.
- **Meta-heurísticos.** Recocido simulado (SA), Búsqueda de tabú (TS) y Algoritmos genéticos (GA).
- **Heurísticos.** Reglas de secuenciamiento.
- **Inteligencia Artificial (AI).** Métodos basados en reglas, Métodos basados en agentes y Sistemas expertos.

- **Métodos híbridos.** Métodos exactos + CP, Métodos exactos + Heurísticos y Meta-heurísticos + Heurísticos.

Además de las contribuciones anteriores, existen software académicos y comerciales para el secuenciamiento de procesos. En la Tabla 1.1 se muestran los grupos académicos que cuentan con herramientas computacionales para secuenciamiento de lotes. En la Tabla 1.2 se muestra el software comercial que ha surgido en los últimos años y que actualmente están disponibles en el mercado y para los cuales el usuario solo necesita especificar la información del problema.

En 2007 Zhang y Epstein [10] presentaron una metodología de secuenciamiento para procesos lote en el contexto industrial basado en la teoría de lógica difusa. Las entradas incluyen la prioridad de las tareas y su posición en el flujo del proceso. Mostraron en un ejemplo numérico que su metodología reduce el tiempo de producción.

Ferris y colaboradores [11] desarrollaron en el mismo año un esquema dinámico de descomposición del problema para su cálculo por mallas. El problema estudiado es el secuenciamiento y procesamiento por lotes simultáneo de procesos por lote multi-etapa. El algoritmo descompone el problema original en un subproblema de primer nivel basado en las decisiones del procesamiento por lotes. Los subproblemas que quedan sin resolver se descomponen en subproblemas de segundo nivel basados en decisiones de asignación a una unidad lote en una etapa. El proceso se repite hasta que todos los subproblemas son resueltos.

Otro estudio en reactores continuos lo hicieron Terrazas-Moreno y colaboradores [45], en 2007 propusieron una solución simultánea de secuenciamiento y control para CSTR de polimerización multigrado. La metodología es similar a la anterior, transforman el problema MIDO a un MINLP usando colocación ortogonal sobre elementos finitos. El objetivo fue minimizar costos de operación considerando precios del polímero, costos de inventario y de transición.

Durante el mismo año Castro y colaboradores [29] propusieron la solución simultánea del secuenciamiento a corto plazo de plantas lote de una sola etapa junto con la selección óptima del número de lotes para producir. Lo novedoso es que a pesar de seguir el enfoque tradicional de considerar una tarea de procesamiento por lote, en su trabajo todos los lotes del producto se consideran dentro de una sola tarea.

En 2013 Gutierrez Limón y Flores Tlacuahuac [3] propusieron una estrategia de solución simultánea de secuenciamiento y control para reactores continuos de polimerización. La técnica de control usada fue control predictivo basado en modelos (MPC). La metodología consiste en formular un problema de optimización dinámica mixto-entero (MIDO) que se discretiza usando colocación ortogonal sobre elementos finitos

Institución	Investigador(es)
Abo Akademi University	<i>T. Westerlund</i> (http://www.abo.fi/twesterl/)
Carnegie Mellon University	<i>I.E. Grossmann</i> (http://egon.cheme.cmu.edu)
Imperial College	<i>C. Pantelides, N. Shah</i> (http://www.ps.ic.ac.uk)
INETI	<i>P. Castro</i> (http://www.ineti.pt/colaborador.aspx?id=7540UO=subUO=)
Instituto Superior Lisbon	<i>A. Barbosa Pova</i> (http://alfa.ist.utl.pt/d3662/)
INTEC-CONICET	<i>J. Cerdá and C. Méndez</i> (http://intecwww.arcrde.edu.ar/jcerda/)
National University of Singapore	<i>I.A. Karimi</i> (http://www.chee.nus.edu.sg/staff/000731karimi.html)
Polytechnic University	<i>J. Pinto</i> (http://www.poly.edu/faculty/josempinto/)
Princeton University	<i>C.A. Floudas</i> (http://titan.princeton.edu/home.html)
Purdue University	<i>J. Pekny and G.V. Reklaitis</i> (http://engineering.purdue.edu/ChE/Research/Systems/index.html)
Rutgers University	<i>M. Ierapetritou</i> (http://sol.rutgers.edu/staff/marianth/)
Technical University Graz	<i>R.E. Burkard</i> (http://www.opt.math.tu-graz.ac.at/burkard/)
Universitat Politècnica de Catalunya	<i>L. Puigjaner</i> (http://deq.upc.es/wwwdeq/cat/infogral/curriculs/....html)
University College London	<i>L. Papageorgiou</i> (http://www.chemeng.ucl.ac.uk/staff/papageorgiou.html)
University Karlsruhe (TH)	<i>K. Neumann</i> (http://www.wior.uni-karlsruhe.de/LS-Neumann/)
University of Dortmund	<i>S. Engell</i> (http://www.bci.uni-dortmund.de/ast/en/content/.../engell.html)
University of Sao Paulo	<i>J. Pinto</i> (http://www.lscp.pqi.ep.usp.br/pro-zeca.html)
University of Tessaloniki	<i>M. Georgiadis</i> (http://www.cperi.certh.gr/en/compro.shtmlSECT2)
University of Wisconsin	<i>C. Maravelias</i> (http://www.engr.wisc.edu/che/faculty/maravelias-christos.html)

Tabla 1.1: Grupos académicos con software para secuenciamiento por lotes [6]

Software	Marca
Aspen Plant Scheduler	AspenTech
Model Enterprise Optimal Single-site Scheduler	Process systems Enterprise
VirtECS Schedule	Advanced Process Combinatorics
SAP Advanced Planner and Optimizer (APO)	SAP

Tabla 1.2: Software para secuenciamiento por lotes [6]

transformando así a un problema de programación no lineal mixto-entero (MINLP).

En 2014 Chu e You [52] propusieron un algoritmo para la integración del secuenciamiento y optimización dinámica para un reactor CSTR multiproducto, este algoritmo está basado en el método de descomposición de Bender, dicho método es usado para transformar el problema MIDO a un problema de programación lineal mixto-entero (MILP).

En el mismo año Chu e You [53] desarrollaron dos métodos para la solución del problema integrado de planeación, secuenciamiento y optimización dinámica para procesos lote con tamaño fijo de lote, el problema al igual que los anteriores es formulado primero como un problema MIDO que después es transformado a un MINLP gracias a su discretización.

Durante el mismo año Zhuge e Ierapetritou [24] indicaron que la integración del secuenciamiento y control resolviendo problemas MINLP a cada intervalo de tiempo requiere una considerable carga computacional. Para reducir este tiempo incorporaron control predictivo basado en modelos multi-paramétricos (mp-MPC) en la integración de secuenciamiento y control para procesos lote.

En 2015, Nie y colaboradores [54] proponen un enfoque de optimización basado en modelos para la integración de secuenciamiento y optimización dinámica para procesos lote y continuos. Utilizan el algoritmo generalizado de descomposición de Benders (GBD) para resolver el problema MINLP aplicado a dos reactores semilote paralelos de polimerización y unidades de almacenamiento y purificación continuas.

1.4.2. Control de procesos

En 1989 Kravaris y colaboradores [12] proponen un controlador no lineal para procesos lote no lineales en los cuales la función de transferencia no puede representar al sistema sobre toda la trayectoria. Aplica el método a un reactor de copolimerización por lote.

En 1991 Bequette [50] analiza técnicas de control de sistemas no lineales con enfoque al control predictivo basado en programación no lineal. Discute la capacidad de esas

técnicas para abordar problemas comunes en procesos químicos como el tiempo de retardo, restricciones e incertidumbre en el modelo.

Un año después Peterson y colaboradores [48] desarrollan un método de control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC). El algoritmo de control usa el modelo explícito del proceso no lineal y los elementos básicos de la matriz dinámica de control (DMC). La característica principal del método es la actualización de la DMC al entrar las perturbaciones y la consideración del efecto de las no linealidades en el horizonte de predicción. El modelo es aplicado a un reactor de polimerización semilote.

En 1993 Soroush y Kravaris [36] desarrollan una metodología de operación y diseño óptimos para un reactor lote de polimerización de metil meta-crilato (MMA). Primero desarrollan el modelo matemático el cual incluye el efecto gel y la reducción del volumen del reactor. Calculan numéricamente el perfil de temperatura (que minimiza la polidispersidad del polímero final y maximice la conversión del monómero restringido a un valor deseado de peso molecular promedio). También analizan las condiciones óptimas del sistema de calentamiento/enfriamiento, flexibilidad, controlabilidad y seguridad del mismo.

En 1996 Chang y colaboradores [41] proponen un método integrado de optimización y control de procesos lote. El método asegura que el reactor sigue una trayectoria optimizada del modelo através de una estructura de control linealizado globalmente modificado (MGLC).

Mo y colaboradores [28] desarrollan en 1998 un modelo matemático para la polimerización de MMA en un reactor lote que incluye el efecto gel. Aplican la teoría de control óptimo con el principio mínimo de Pontryagins para calcular la trayectoria de temperatura óptima del reactor para obtener el polímero a una conversión de monómero y pesos moleculares deseados.

En el mismo año Krishnan y Kosanovich [5] desarrollan control predictivo basado en modelos múltiples (MMPC) basado en modelos estado-espacio lineales de tiempo variante para regular procesos lote de acuerdo con múltiples perfiles de referencia pre-especificados. Aplicaron este controlador a un reactor lote de polimerización.

En 2002 Silva y Oliveira [15] desarrollan una metodología para la optimización de sistemas de polimerización por lotes usando un enfoque de trayectoria factible con la teoría de MPC. Aplican la metodología a la polimerización de cloruro de vinilo y MMA por lotes.

En el mismo año Sampath y colaboradores [49] desarrollan una estrategia de control no lineal robusta para problemas de seguimiento de trayectorias de temperatura en reactores lote en presencia de incertidumbres. El lazo interno de control aproxima

entradas-salidas de la planta. El lazo externo desarrolla la estabilidad y robustes.

También en 2002 Erdogan y colaboradores [42] investigan experimentalmente el desempeño de las condiciones de operación para controlar un reactor lote de polimerización. Analizaron el efecto que tiene la velocidad de agitación en la conversión del monómero y el coeficiente de transferencia de calor para controlar las cadenas de polímeros, así como el enchaquetado del reactor. La respuesta del reactor a los diferentes cambios en velocidad de agitación y entrada de calor se obtuvieron experimentalmente. Proponen algunas correlaciones de viscosidad y del coeficiente de transferencia de calor sobre la conversión del monómero.

En 2005 Baranitharan y colaboradores [44] aplicaron control óptimo a un reactor lote no isotérmico de polimerización de MMA por radicales libres. La temperatura del fluido dentro de la chaqueta es usada como la función control para realizar cuatro objetivos de control. Los dos primeros objetivos son: maximizar la conversión del monómero en un tiempo de operación especificado y la minimización del tiempo de operación para una conversión de monómero especificada. Los otros dos objetivos son maximizar la conversión del monómero para pesos moleculares específicos de polímero. Aplican el método de algoritmos genéticos para lograr los cuatro objetivos de control óptimo.

En el mismo año Flores-Cerrillo y MacGregor [21] presentan una estrategia de LV-MPC para el seguimiento de trayectorias y rechazo de perturbaciones para procesos lote. La estrategia está basada en el análisis del componente principal (PCA) de modelos de procesos lote.

Un año después Bouhenchir y colaboradores [19] aplicaron la técnica de control predictivo funcional (PFC) para el control de temperatura de un reactor lote con sistema mono fluido de calentamiento/enfriamiento. Encontraron que esta técnica permite un seguimiento preciso de la trayectoria de referencia y que se puede mejorar con un modelo dinámico del proceso.

En 2008 Ekpo y Mujtaba [16] proponen una estrategia de control y optimización dinámica para generar perfiles óptimos de polimerización de MMA. Usan la temperatura del reactor lote como variable controlada dentro de intervalos de tiempos discretos. Evalúan el desempeño de dos controladores para el seguimiento de la trayectoria del sistema: Control basado en modelos genéricos (GMC) y Control basado en modelos inversos de redes neurales (IMBC). El enfoque de las redes neurales lo utilizan para estimar la liberación de calor del reactor.

En 2009 Golshan y colaboradores [31] desarrollan el control predictivo basado en modelos de variable latente (MLV-MPC) basado en el análisis del componente principal (PCA). La metodología propuesta es capaz de seguir una trayectoria y rechazar

perturbaciones.

En 2010 Golshan y colaboradores [32] desarrollaron algoritmos de control predictivo basado en modelos de variable latente (LV-MPC) para el seguimiento de trayectorias y rechazo de perturbaciones en procesos lote, presentaron dos formulaciones; una basada en la optimización en el espacio de la variable latente y la otra en la optimización directa sobre un vector finito de variables manipuladas futuras. En ambos casos, la predicción de las trayectorias futuras se lleva a cabo utilizando métodos estadísticos.

Otro trabajo de Golshan y colaboradores [33] lo realizan un año después sobre LV-MPC para el seguimiento de trayectorias en procesos lote, en donde presenta tres enfoques alternativos para el modelado: Despliegue en forma discontinua (BWU), Despliegue por observación con tiempo de retardo (OWTU) y despliegue en forma discontinua regularizado (RBWU).

En el mismo año, Cruz Jiménez y colaboradores [7] diseñaron y evaluaron el desempeño de control para reactores CSTR de polimerización. En una primera etapa diseñaron el esquema de control con acción proporcional y en una siguiente agregaron la acción integral, proponen la sintonía de ambos controladores en función de un solo parámetro. Evalúan el desempeño aplicando una perturbación a la entrada y considerando errores en el modelo.

En 2012 Benavides y Diwekar [46] aplicaron control óptimo estocástico a un reactor lote de biodiesel para optimizar la concentración del mismo controlando la temperatura del reactor, la estrategia que aplicaron está basada en el principio máximo, con esta estrategia lograron incrementar la concentración de biodiesel en un 8.46 %.

Un año después se realizaron los siguientes estudios:

Brásio y colaboradores [39] utilizaron control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC) para predecir los perfiles de control óptimo del modelo dinámico donde se resuelve un problema de optimización a cada tiempo de muestreo. Las variables manipuladas son el flujo de alimentación de metanol y la demanda de calor. Su trabajo incluye el desarrollo económico para un reactor semilote a escala industrial.

Benavides y Diwekar [47] presentaron la formulación de problemas de control óptimo de concentración máxima, tiempo mínimo y máximas ganancias así como el análisis de sus solución. Usaron el principio máximo para evitar la solución de ecuaciones diferenciales parciales o de segundo orden, además consideran la incertidumbre en la composición de la alimentación y sus efectos en la solución de control óptimo.

Christofides y colaboradores [13] presentaron una revisión de los distintos algoritmos sobre MPC analizando sus ventajas y desventajas que tienen entre si.

Golshan y MacGregor [34] proponen una metodología para identificar variables la-

tentes y construir el modelo dinámico de control para el seguimiento de trayectorias en procesos lote.

Yu y Flores-Cerrillo [20] Analizan estabilidad, robustes y desarrollo de control del algoritmo LV-MPC propuesto anteriormente por Flores-Cerrillo y MacGregor [21]. Proponen una metodología para determinar el rango adecuado de los parámetros del LV-MPC. Aplican esta metodología para el seguimiento de la trayectoria de temperatura de un proceso de polimerización.

Suvire y colaboradores [9] presentan una metodología basada en álgebra lineal para diseñar algoritmos de control para el seguimiento de trayectorias de un reactor CSTR. La metodología es simple y fue diseñada originalmente para sistemas mecánicos multi-variables no lineales.

Lucía y colaboradores [43] presentan un esquema robusto de control de NMPC multi-etapa que incluye la incertidumbre del modelo del reactor de polimerización semi-lote.

En 2014, Hosen y colaboradores [4] analizaron tres controladores para el seguimiento óptimo de la trayectoria de un reactor lote de polimerización por radicales libres de estireno. Los tres controladores analizados son: Control predictivo basado en modelos de redes neuronales (NN-MPC), Controlador de lógica difusa (FLC) y Controlador de modelos genericos (GMC). Los perfiles de temperatura mínimos son determinados usando el principio máximo Hamiltoniano. Los estudios revelaron que el NN-MPC es superior a los otros dos controladores.

En el mismo año Laurí y colaboradores [14] proponen una metodología para asegurar la validez de las predicciones cuando se aplica MPC a procesos lote. Proponen cuatro indicadores de validación: dos de ellos consideran todas las variables en el modelo y los otros dos consideran los grados de libertad del controlador. Estos indicadores son definidos del modelo de variable latente.

Durante el mismo año Abbaszadeh y Solgi [27] desarrollan un controlador predictivo basado en modelos para un proceso de polimerización por lotes. El modelo físico del proceso es parametrizado a lo largo de una trayectoria deseada y los parámetros son identificados experimentalmente. El problema de optimización en el controlador es resuelto por algoritmos genéticos.

1.5. Hipótesis

Con base en la información anterior se plantea la siguiente hipótesis de este trabajo:

La aplicación de técnicas de secuenciamiento y de control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC) permitirán el análisis y mejoras en la operación de procesos

lote y servirán como base para su integración.

1.6. Objetivos

1.6.1. Objetivo general

Identificar y formular el secuenciamiento y control de reactores lote como un paso preliminar para su tratamiento simultáneo.

1.6.2. Objetivos particulares

- Estudiar el secuenciamiento y control de procesos lote.
- Establecer la problemática y el secuenciamiento de procesos lote.
- Diseñar un controlador por medio de control predictivo basado en modelos no lineales para procesos lote.

1.7. Justificación

El procesamiento por lotes es un componente importante de la industria química. Operaciones como el secado, el mezclado, la destilación y la reacción son usadas para producir alimentos, medicamentos y otros productos especializados como polímeros regularmente se realizan en lotes. Por lo tanto, el secuenciamiento óptimo de la producción es crucial en este tipo de procesos.

Un rasgo característico de los procesos por lote es la manufactura de múltiples productos usando el mismo equipo, es decir, cuando los productos son similares en su naturaleza requieren las mismas etapas de procesamiento y pasan a través de la misma serie de unidades de procesamiento. Frecuentemente los lotes son producidos secuencialmente. Procesos de este tipo son conocidos como procesos multi-producto. Debido a que los tiempos de procesamiento son diferentes para cada producto, el tiempo total requerido para producir un conjunto de lotes depende de la secuencia en que son producidos. Para maximizar la productividad de la planta los lotes deben producirse en una secuencia que minimice este tiempo total.

Es importante señalar que los procesos por lotes tienen retos específicos de modelamiento y control debido a su inherente naturaleza no estacionaria, la no linealidad de sus modelos y la complejidad dinámica, entre otros.

1.8. Organización del trabajo

La organización de este trabajo de tesis es la siguiente:

1. Introducción. Se describen los procesos por lote, sus principales características, el problema de control y de secuenciamiento. Además incluye la hipótesis, objetivos, justificación, estado del arte y la organización del trabajo.
2. Marco teórico general. Conceptos de reactor lote, problema de secuenciamiento y los principales aspectos a considerar para plantear un modelo de optimización, técnica de control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC) y el tema de no linealidad que presentan los procesos lote.
3. Secuenciamiento de reactores lote. Planteamiento, formulación y simulación del problema de secuenciamiento.
4. Control de reactores lote. Planteamiento, formulación y simulación de NMPC.
5. Conclusiones.
6. Bibliografía.

Capítulo 2

Marco Teórico General

En este segundo capítulo se incluyen los conceptos de secuenciamiento, sus principales características y aspectos a considerar para tratarlo como un problema de optimización. Las características del método de NMPC y el problema de linealidad que presentan los procesos lote. Por último presento el caso de estudio de este trabajo; modelo matemático y parámetros de diseño.

2.1. Secuenciamiento

Actualmente en la industria, la administración de recursos y el control de procesos son actividades sumamente importantes ya que involucran problemas de planeación de productos, secuenciamiento y control de los mismos. La planeación del producto se realiza a un mediano o largo plazo, pueden ser días, semanas o meses. El secuenciamiento generalmente se realiza a corto plazo, involucra el conocimiento de las demandas del producto, secuencia de producción, etc. Las acciones de control garantizan el cumplimiento de especificaciones del producto y el buen funcionamiento del proceso.

Con la globalización de la economía mundial, la operación de procesos químicos bajo condiciones óptimas ha tenido mayor importancia. La filosofía es minimizar costos o tiempos de operación, o bien, maximizar ganancias.

Las operaciones de secuenciamiento involucran la determinación de secuencias de producción, condiciones de operación óptimas como flujos, temperaturas, concentraciones, etc., a partir de cierta información como demandas de productos, costos de inventario, disponibilidad de materia prima, etc. Normalmente en las operaciones de secuenciamiento se minimiza la cantidad de producto fuera de especificación que se produce durante la transición entre un producto y otro, sin embrago, en procesos lote esto no ocurre, lo que se hace es reducir el tiempo de procesamiento, tiempo de paro

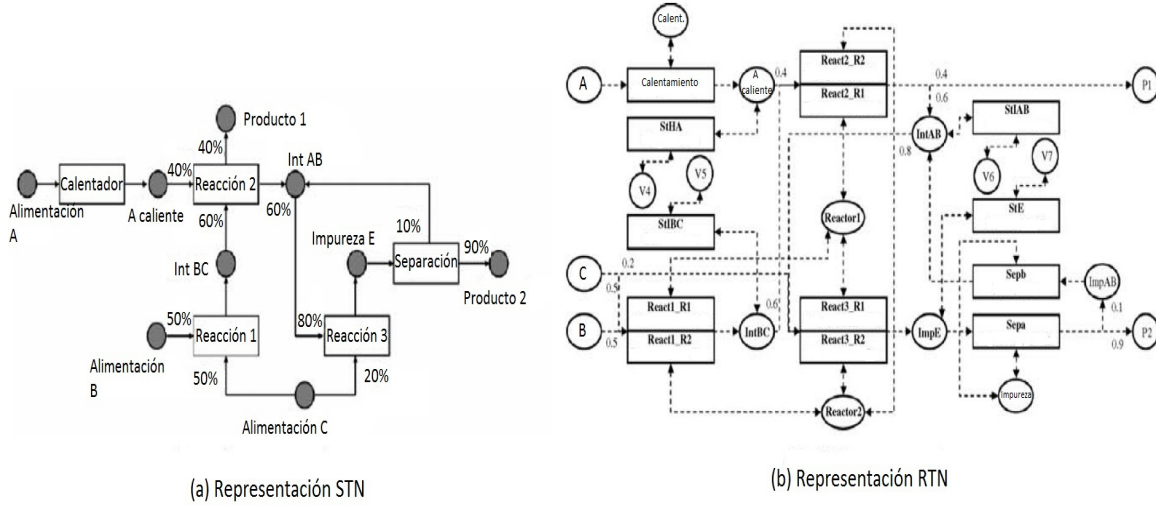


Figura 2.1: Proceso lote con estructura compleja de trabajo [6]

de los equipos o alcanzar la máxima conversión de reacción.

En los últimos veinte años se han desarrollado avances importantes en el área de optimización y secuenciamiento para procesos lote, sin embargo, a pesar de estos avances todavía existen preguntas al problema. Por ejemplo, no queda suficientemente claro que método elegir para una estructura compleja (ver Figura 2.1) que también pueda ser aplicada a las estructuras comúnmente encontradas en la industria tal como la estructura multietapa (ver Figura 2.2). También hay muchas preguntas relacionadas a la capacidad para manipular un número elevado de criterios operacionales (por ejemplo tamaño de lote fijo o variable, políticas de almacenamiento y transferencia, cambios) así como objetivos diferentes (por ejemplo retención, adelantamiento o minimización de costos). Finalmente, también hay preguntas sobre las limitaciones y virtudes de varios modelos que han sido reportados en la literatura y el tamaño de problemas que se pueden resolver con cada uno de ellos [6].

En la operación de procesos industriales el secuenciamiento es crucial para la mejora de la producción. Hay una gran variedad de aspectos que deben ser considerados cuando se desarrollan modelos de secuenciamiento para procesos lote. Estos aspectos generales se muestran en la Figura 2.3 para clasificar las características mas importantes del problema. Como se puede observar están divididos en trece categorías y consideran problemas de equipo, material, tiempo, etc. Esto significa que la tarea de aplicar un método que involucre todos los aspectos del diagrama es muy complicada.

En la práctica muchos procesos lote son secuenciales, procesos de una o múltiples etapas, donde una o algunas unidades pueden trabajar en paralelo en cada etapa. Cada lote necesita ser procesado siguiendo una secuencia de etapas definida a través de un

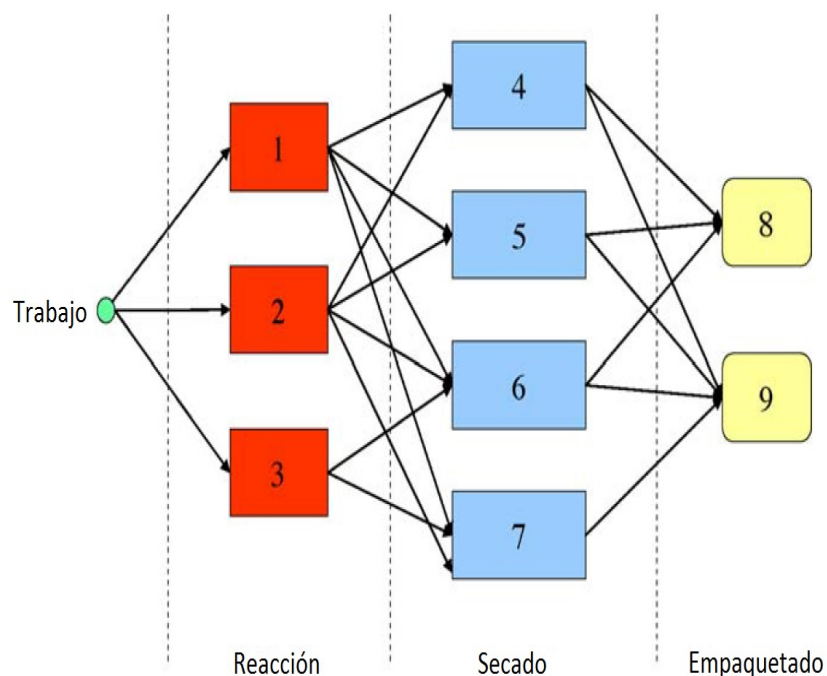


Figura 2.2: Proceso lote con estructura secuencial [6]

procedimiento de operación [6].

Sin embargo, el reciente incremento de aplicaciones a llegado a ser cada vez mas complejo, actualmente se trabaja con superestructuras que comparten equipos y buscan reducir costos de operación. Además, los procesos incluyen operaciones de mezclado, agitado y recirculación de material. Por tanto, las consideraciones que se deben tomar son restricciones a los equipos en terminos de asignación, conectividad, arreglos fijos o variables.

Otro aspecto importante del proceso es el flujo de requerimientos que se refleja en las políticas de inventario. Esto frecuentemente involucra políticas como almacenamiento limitado, tanques compartidos, cero espera o almacenamiento ilimitado. La transferencia de material muchas veces se asume como instantáneo, pero en algunos casos debido a la extensa tubería de las plantas debe ser considerado en el modelo.

Otro factor principal es el requerimiento del tamaño del lote. Por lo general, las plantas farmacéuticas usualmente trabajan con tamaños fijos que deben ser mantenidos (sin mezclar ni agitar), mientras que las plantas de solventes y polímeros usan tamaños de lote variables que además pueden ser mezclados y agitados. Similarmente los requerimientos de tiempos de procesamiento pueden ser diferentes dependiendo de las características de los procesos. Por ejemplo en aplicaciones farmacéuticas se involucran tiempos fijos debido a normas y regulaciones sanitarias, mientras que en solventes

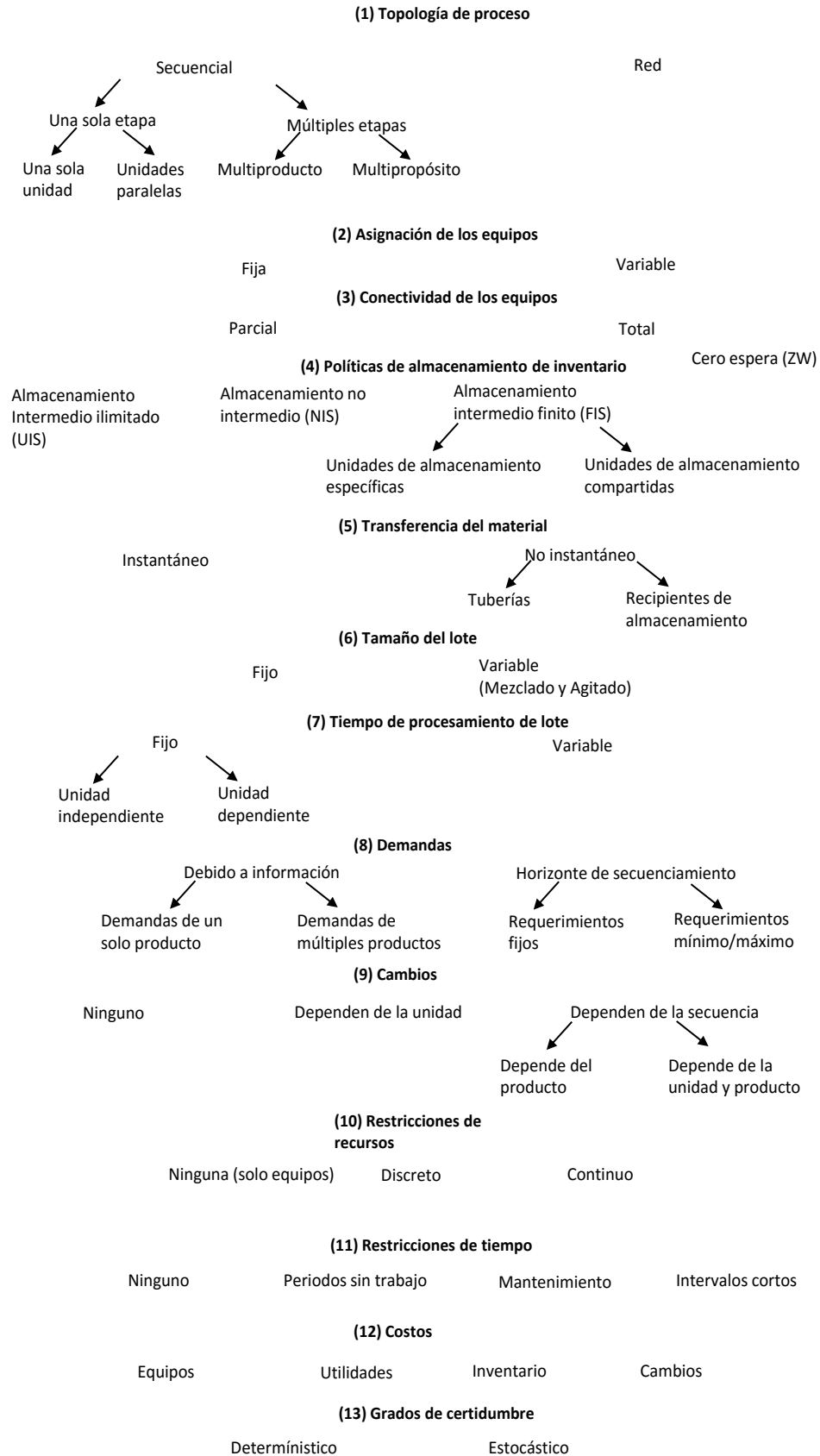


Figura 2.3: Mapa mental del problema de secuenciamiento [6]

o polímeros los tiempos pueden ser ajustados y optimizados con el modelo del proceso.

Los patrones de demanda también pueden variar significativamente, que van de casos donde obligatoriamente se debe cumplir un pedido para cierta fecha a casos donde en temporadas del año el margen de producción debe ser conocido sobre un horizonte de tiempo (cantidades fijas o mínimas).

Los cambios son también un factor muy importante en casos donde la secuencia de productos son dependientes de las transiciones. Las restricciones a las jornadas de trabajo y utilidades también juegan un papel importante. Consideraciones como periodos sin trabajo o de mantenimiento. Por otra parte, el secuenciamiento está considerado como un problema de factibilidad, los costos asociados con el uso de equipo, inventarios, cambios y utilidades impactan significativamente la definición de secuencia óptima.

Existe también un grado de desconocimiento de información que debe ser tomado en cuenta y que es particularmente crítico para el cumplimiento de las demandas, este es el uso de horizontes de tiempo muy largos en donde no tienes la certeza del surgimiento de algún problema en los equipos, materia prima o en las mismas demandas.

2.1.1. Clasificación de modelos de optimización para secuenciamiento de lotes

En el apartado anterior se mostraron los aspectos generales del problema de secuenciamiento de lotes y en la Figura 2.4 se muestran las principales características del enfoque de optimización. En esta subsección se presenta una alternativa a la formulación del problema descrita por Méndez y colaboradores [6]. Esta alternativa tiene un impacto directo en el desarrollo computacional, capacidades y limitaciones del modelo de optimización resultante.

El diagrama en la Figura 2.4 muestra la clasificación del modelo de optimización para secuenciamiento de lotes que considera cuatro aspectos principales.

Representación del tiempo

Es la primer característica y la más importante. Dependiendo si las tareas de la secuencia pueden llevarse a cabo en algún instante de tiempo predefinido o pueden ocurrir en cualquier momento durante el horizonte de tiempo de interés. Este problema de tiempo puede ser clasificado en formulaciones de tiempo discreto y de tiempo continuo.

Los modelos de tiempo discreto están basados en:

- Horizonte de secuenciamiento dividido en un número finito de intervalos de tiempo con duración predefinida y

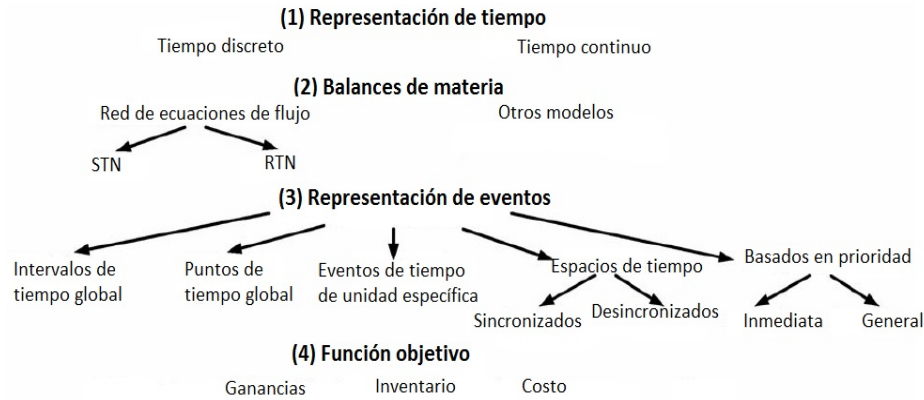


Figura 2.4: Mapa mental de modelos de optimización para secuenciamiento de plantas lote [6]

- Permitiendo que el inicio y fin de las tareas ocurran sólo en las fronteras de esos periodos de tiempo

Por lo tanto, las restricciones de secuenciamiento solo tienen que ser monitoreadas a puntos de tiempo específicos y conocidos, lo cuál reduce la complejidad del problema y hace la estructura del modelo más simple y más fácil de resolver, particularmente cuando se toman en cuenta limitaciones de inventario. Por otro lado, esta simplificación del problema tiene dos principales desventajas. Primero, el tamaño del modelo matemático y su eficiencia computacional dependen del número de intervalos de tiempo elegidos, lo cual significa que la solución está en función de la información disponible del problema. Segundo, se pueden generar secuencias subóptimas o incluso infactibles por la reducción de decisiones en el dominio de tiempo.

A pesar de haber hecho una versión simplificada del problema de secuenciamiento original, la formulación discreta ha sido eficiente y se ha adaptado a aplicaciones industriales, esencialmente en aquellos casos donde se cuenta con un número razonable de intervalos para poder representar el modelo deseado.

Para evitar las limitaciones del método previo, se usó una representación de tiempo continuo. En esta formulación, las decisiones de tiempo son explícitamente representadas como un conjunto de variables definiendo los tiempos exáctos a los cuales los eventos se llevan a cabo. En el caso general, una variable de tiempo manipulada permite obtener una reducción significativa del número de variables del modelo y al mismo tiempo generar mas soluciones. Sin embargo, esto conlleva a necesitar restricciones de inventario mas complicadas.

Balances de materia

La manipulación de lotes y tamaños de lotes da lugar a dos categorías de modelo de optimización. La primer categoría se refiere al enfoque monolítico, el cuál funciona simultáneamente con el conjunto óptimo de lotes (número y tamaño), la asignación y secuenciamiento de recursos y el tiempo de procesamiento de tareas. Este método también debe coincidir con el procedimiento operativo de cada producto. Su generalidad usualmente implica un modelo muy grande y su aplicación restringida a procesos que involucran un número pequeño de procesamiento de tareas en vez de horizontes cortos de secuenciamiento. Estos modelos emplean la red estado-tarea (STN), o la red recurso-tarea (RTN) para representar el problema. Como se mostró en la Figura 2.1a, los modelos STN representan el problema asumiendo que el procesamiento de tareas produce y consume estados (materiales). El STN consiste de tres elementos clave:

- *nodos estado* representando alimentaciones, productos intermedios y productos finales.
- *nodos tarea* representando las operaciones del proceso las cuales transforman el material de uno a más estados de entrada en uno o más estados de salida
- *arcs* que liga estados y tareas indicando el flujo de materiales.

Los nodos de estado y tareas son denotados por círculos y rectángulos, respectivamente. En contraste, las formulaciones RTN emplean un marco uniforme de tratamiento y representación para todos los recursos disponibles a través de la idea que las tareas de procesamiento y almacenamiento consumen y generan recursos a sus tiempos de inicio y fin, respectivamente (ver Figura 2.1b). En este caso particular, los círculos no solo representan estados, también unidades de procesamiento y recipientes.

La segunda categoría comprende modelos que asumen que el número de lotes de cada tamaño es conocido. Estos algoritmos de solución pueden ser considerados como uno de los módulos con enfoque de solución al secuenciamiento de producción, son muy usados en la industria, descomponen el problema en dos etapas, procesamiento por lotes y secuenciamiento de lotes. El problema de procesamiento por lotes convierte los requerimientos primarios de los productos en lotes individuales con el objetivo de optimizar algunos criterios como la carga de trabajo de la planta. Después de eso los recursos disponibles fabricados son asignados a los lotes. Estas dos etapas funcionan mejor que los métodos monolíticos para problemas largos que incluyen un número muy grande de tareas.

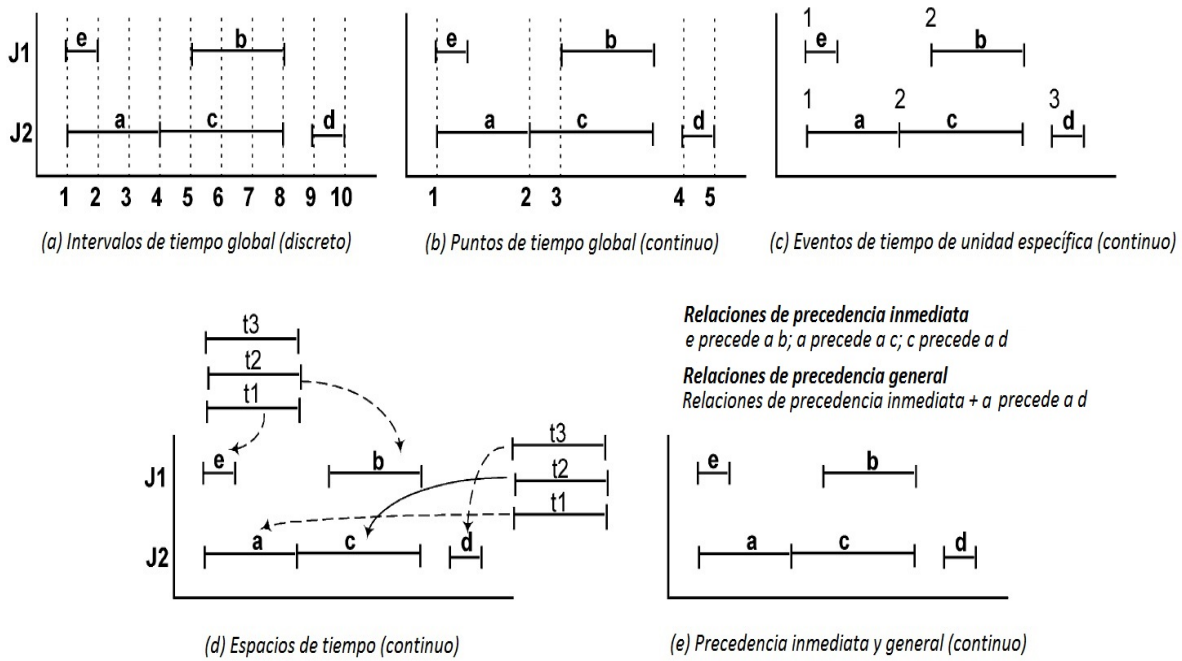


Figura 2.5: Conceptos diferentes para representar problemas de secuenciamiento [6]

Representación de eventos

Los modelos de secuenciamiento están basados en diferentes conceptos o ideas básicas con el principal objetivo que la capacidad máxima de recursos compartidos nunca se exceda. Como puede verse en la Figura 2.5, esos conceptos se clasificaron en cinco tipos diferentes de representación de eventos, los cuales han sido utilizados para desarrollar una variedad de formulaciones matemáticas de problemas de secuenciamiento de lotes. Esta representación esquemática es obtenida de la misma secuencia usando cada uno de los conceptos. El ejemplo incluye cinco lotes (**a**, **b**, **c**, **d**, **e**) asignados a dos unidades (**J1**, **J2**). Para representar esta solución, las diferentes alternativas requieren: (a) 10 intervalos de tiempo fijo, (b) cinco puntos de tiempo global variable, (c) tres eventos de tiempo de unidad específica, (d) tres espacios de tiempo desincronizados para cada unidad, (e) tres relaciones de precedencia inmediata o cuatro relaciones de precedencia general. Aunque algunas representaciones de eventos son más general que otras, usualmente están orientadas hacia la solución de procesos lote secuenciales.

Función objetivo

Existen diferentes formas de medir la calidad de la solución de los problemas de secuenciamiento (ver Figura 2.3). Sin embargo, el criterio seleccionado para la opti-

mización generalmente tiene un efecto directo sobre el desarrollo computacional del modelo. Además, algunas funciones objetivo pueden ser muy difíciles de implementar para algunas representaciones de eventos, requiriendo así de variables adicionales y restricciones complejas.

El problema de secuenciamiento también incluye costos asociados con el uso de equipo, inventarios y utilidades que pueden tener un impacto significativo [6].

En plantas de polimerización, se especifican un cierto número de polímeros en términos de su conversión y/o peso molecular. Cada grado se obtiene con la misma materia prima pero usando diferentes condiciones de operación como la concentración inicial del monómero y/o del iniciador. En términos del problema de secuenciamiento, las condiciones límite para las demandas de los diferentes grados de polímero son especificadas, todos los grados deben ser producidos durante un ciclo de producción, el tiempo óptimo de dicho ciclo es parte de la solución del problema [45].

2.2. Control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC) en procesos lote

Los procesos lote exhiben muchas características que dirigen la investigación de problemas de control. Hay procesos de duración finita en los cuales el objetivo es lograr un producto deseado al final del lote. La calidad del producto generalmente solo se mide fuera de línea, es decir, en un laboratorio de control de calidad después de haber completado el lote. Además, los procesos lote son dinámicos, generalmente son no lineales y varían continuamente durante la operación del lote.

Básicamente hay dos niveles de control para procesos lote. El nivel de control más alto es el control de calidad del producto al final del lote. El nivel bajo de control es el seguimiento de una trayectoria de una variable de proceso [32].

En la práctica, el problema de control de alto nivel de las propiedades finales del producto no se trata directamente, se realiza a través de la automatización del proceso, el secuenciamiento de todas las etapas y la implementación de controles de bajo nivel. Estos procesos lote se operan a lazo abierto y se logra una calidad aceptable en la mayoría de los casos.

En la literatura se han logrado controles de alto nivel para la calidad del producto final basados generalmente en modelos mecánicos. Se han propuesto algoritmos no lineales de optimización/control combinados con algoritmos de estimación de estados no lineales para continuar con el recálculo de trayectorias óptimas durante la operación

del lote [32].

El problema de control de bajo nivel involucra el seguimiento de trayectorias de variables de proceso claves tales como la temperatura, presión o la concentración de un reactante. Las trayectorias deseadas son obtenidas ya sea de la experiencia, de una optimización fuera de línea o de la ejecución de un control de alto nivel. En la práctica industrial esos problemas de control de seguimiento de trayectorias usualmente son resueltos con controladores PID. Sin embargo, cuando el control no es uniforme sobre la operación de todo el lote debido principalmente a la dinámica del proceso o cuando se tiene la necesidad de seguir una trayectoria compleja se han propuesto varias versiones de control predictivo basado en modelos no lineal (NMPC) [32].

El control predictivo basado en modelos (MPC) es un método basado en el control óptimo para seleccionar entradas de control que minimicen una función objetivo. La función objetivo es definida en términos de variables presentes y predichas, y es evaluada usando un modelo explícito para predecir las salidas futuras del proceso.

Una estrategia de control predictivo basado en modelos no lineal (NMPC) requiere la formulación de un problema de optimización. Para la implementación en línea de NMPC el problema de programación no lineal debe ser resuelto numericamente a cada intervalo de muestreo, mientras que el NMPC explícito asume que una representación explícita de la solución puede ser calculada usando programación no lineal multiparamétrica. Los elementos clave para la formulación del problema de optimización son procedimientos de discretización y parametrización [2].

2.2.1. Lineal vs No lineal

Como se mencionó en párrafos anteriores, una de las características de los procesos lote es que presentan no linealidad, esto hace que sea mas complicado su control.

A pesar de esto, los procesos no lineales han sido controlados tradicionalmente usando análisis de sistemas lineales. La razón principal de su uso es que hay solución analítica, por lo tanto, generalmente hay más estabilidad y mejores resultados en pruebas. También, la demanda computacional para la simulación de sistemas lineales (y la implementación) usualmente son menores comparadas con la simulación de sistemas no lineales.

Oviamente, el uso de la técnica de sistemas lineales es limitada si un proceso químico es altamente no lineal. El progreso en la teoría de control no lineal, combinado con los avances en la computación, permiten que ahora las estrategias de control no lineal se desarrollen satisfactoriamente en procesos químicos [50].

El control de reactores lote es frecuentemente difícil de lograr debido a su flexibilidad

en la operación y la utilización multipropósito (diferentes configuraciones de operación para diferentes productos). Se debe incrementar la automatización para garantizar la reproducción lote a lote. Debido a la complejidad de la mezcla de reacciones y las dificultades para desarrollar en línea medición de composiciones, control del lote y la alimentación del reactor. Todo esto se resume en un problema de control de temperatura debido a la existencia de calor sensitivo de los reactantes y/o productos, además de la dependencia de la velocidad de reacción sobre la temperatura [19].

El perfil de temperatura en reactores lote usualmente sigue tres etapas:

1. Calentamiento de la mezcla de reacción hasta la temperatura deseada.
2. Mantenimiento del sistema a la temperatura deseada.
3. Etapa de enfriamiento para minimizar la formación de productos no deseados.

En la práctica, el logro de esta tarea puede ser con el controlador convencional proporcional-integral-derivativo (PID), sin embargo, esta aplicación tiene una estabilidad reducida y tiempos muertos largos comparada con otras [35].

A cada intervalo de control, un algoritmo MPC determina una secuencia de ajustes a la variable manipulada que optimiza el comportamiento futuro de la planta. El primer valor en la secuencia óptima es enviado a la planta y la optimización es repetida en los siguientes intervalos de control.

El objetivo general del diseño de MPC es calcular una trayectoria futura de una variable manipulada u para optimizar el comportamiento futuro de la salida de la planta y . La optimización es desarrollada dentro de una ventana de tiempo dada la información de la planta al inicio de la ventana de tiempo. A continuación se describen los términos que son usados frecuentemente en el MPC [26]:

1. Ventana de horizonte de movimiento: La ventana depende de un tiempo arbitrario t_i a $t_i + T_p$. La longitud de la ventana T_p permanece constante. Sin embargo, t_i la cuál se define al inicio de la ventana de optimización, incrementa constantemente un instante de tiempo, el cuál también es definido al inicio.
2. Horizonte de predicción: Indica que tan "lejos" deseamos predecir el futuro. Este parámetro es igual a la longitud de la ventana de horizonte de movimiento, T_p .
3. Horizonte de control: Apesar de que la trayectoria óptima de control futura se describe dentro de la ventana de horizonte de movimiento, la entrada actual de control a la planta solo toma la primer muestra de control y rechaza el resto de la trayectoria.

4. En la planeación del proceso, necesitamos información a tiempo t_i para predecir el futuro. Esta información es denotada como $x(t_i)$ la cuál es un vector que contiene muchos factores relevantes, y es directamente medido o bien, estimado.
5. Un modelo dado que describirá la dinámica del sistema es fundamental en control predictivo. Un buen modelo dinámico dará una predicción consistente del futuro.
6. Para tomar una mejor decisión, es necesario tener un criterio que refleje el objetivo. El objetivo está relacionado a una función de error basada en la diferencia entre la respuesta deseada y la respuesta actual. Esta función objetivo es usualmente llamada función costo J , y la acción de control óptima se encuentra minimizando esta función costo dentro de la ventana de optimización.

2.3. Proceso por lote

2.3.1. Caso de estudio: Polimerización de estireno

Las técnicas de secuenciamiento y control utilizadas en esta tesis se pueden aplicar a un gran número de procesos lote, sin embargo, el método de solución para el problema de control puede variar dependiendo de las características del modelo, es decir, no se atacaría de la misma forma un modelo con ecuaciones diferenciales parciales que un modelo con ecuaciones diferenciales ordinarias, aún mas si son de primer o segundo orden. Para esos casos existen técnicas de control óptimo como el principio máximo [47]. Sin embargo no es el objetivo de esta tesis profundizar en esas técnicas.

La elección de polimerización de estireno como caso de estudio está asociada a que se tiene un problema de interés comercial que puede operarse en modo multi-producto en una misma unidad de procesamiento. La producción de polímeros es un proceso que cumple con estas características, además es un segmento muy importante en la industria de procesamiento químico. Los polímeros se producen en diversos tipos de reactores mediante diferentes mecanismos cinéticos. Un método muy importante de producción de polímeros es la polimerización vía radicales libres en reactores tanque agitado.

En la Figura 2.6 se muestra el problema en estudio, consiste en un reactor lote de tanque agitado en el que se lleva a cabo la polimerización en solución de estireno vía radicales libres. La reacción es exotérmica y se emplea un medio de enfriamiento para remover el calor liberado.

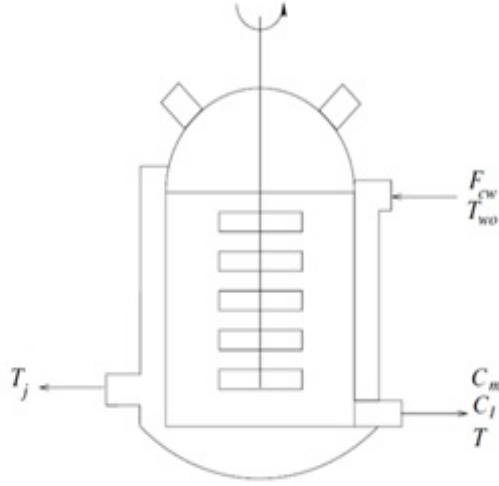


Figura 2.6: Diagrama de flujo del reactor de polimerización [38]

El modelo matemático de dicho reactor se toma de Özkan y colaboradores [18] que incluye los balances de masa del iniciador (I) y monómero (M) y balances de energía para la temperatura del reactor (T) y temperatura de la chaqueta de enfriamiento (T_{co}).

$$\frac{dI}{dt} = -fk_d I \quad (2.1)$$

$$\frac{dM}{dt} = -k_p \left(\frac{2fk_d I}{k_t} \right)^{1/2} M \quad (2.2)$$

$$V\rho C_p \frac{dT}{dt} = Q + (-\Delta H)R_m V - UA(T - \bar{T}_c) \quad (2.3)$$

$$V_c \rho_c C_{pc} \frac{dT_{co}}{dt} = \dot{m} C_{pc} (T_{ci} - T_{co}) + UA(T - \bar{T}_c) \quad (2.4)$$

Donde R_m , \bar{T}_c y U son:

$$R_m = \frac{dM}{dt} = kiMI^{0.5} \quad (2.5)$$

$$\bar{T}_c = \frac{T_{ci} - T_{co}}{2} \quad (2.6)$$

$$U = \frac{1}{S\mu_r^{0.33} + F} \quad (2.7)$$

Donde S y F son constantes:

$$S = \frac{D_t^{1.25}}{1.01 k_r^{0.67} \rho^{0.66} N^{0.66} D_i^{1.45} C_p^{0.33} H_i^{0.12}} \quad (2.8)$$

$$F = \frac{1}{h_0} \left(\frac{D_t}{D_t + 2x} \right) + \frac{D_t x}{\bar{D}_{LM} k_c} \quad (2.9)$$

Para simplificar el modelo definimos

$$k_1 = k_p \left(\frac{2f k_d}{k_t} \right)^{1/2} = A_1 \exp(-E_1/RT) \quad (2.10)$$

Donde A_1 y E_1 son:

$$A_1 = \sqrt{2f} A_p \sqrt{A_d} (A_t)^{-1/2} \quad (2.11)$$

$$E_1 = E_p + E_d/2 - E_t/2 \quad (2.12)$$

Por lo tanto, k_d , k_p , k_t y k_1 son:

$$k_d = A_d \exp \left(\frac{-E_d}{R T} \right) \quad (2.13)$$

$$k_p = A_p \exp \left(\frac{-E_p}{R T} \right) \quad (2.14)$$

$$k_t = A_t \exp \left(\frac{-E_t}{R T} \right) \quad (2.15)$$

$$k_1 = A_1 \exp \left(\frac{-E_1}{R T} \right) \quad (2.16)$$

Por otra parte, la conversión de monómero se define como:

$$X = \frac{M_0 - M}{M_0} \quad (2.17)$$

Los parámetros del modelo se muestran en la Tabla 2.1.

En este trabajo se considera para fines del diseño del esquema de control la simplificación del modelo a sólo el balance sobre el monómero e iniciador, y tomando como variable a manipular la temperatura de operación del reactor.

A_p	1.051×10^7	$l \text{ mol } s^{-1}$
A_t	1.255×10^9	$l \text{ mol } s^{-1}$
A_d	2.6×10^{16}	$cal \text{ mol } K^{-1}$
E_p	7060	$cal \text{ mol } K^{-1}$
E_t	1680	$cal \text{ mol } K^{-1}$
E_d	34200	$mol \text{ l}^{-1}$
M_0	6.092	$g \text{ mol}^{-1}$
I_0	0.0185	$g \text{ mol}^{-1}$
M_w	52000	— — —
X_d	0.5	— — —
f	0.5	— — —

Tabla 2.1: Parámetros cinéticos y físicos usados para el monómero (estireno) e iniciador (BPO) [18].

Esta consideración es común en estudios de control de procesos no-isotérmicos. La justificación de esta consideración es tener un modelo más simple para fines del diseño del controlador y además debido a que la temperatura de operación es la variable que tiene un mayor efecto en la conversión de monómero en un reactor de polimerización. Más aún, una vez determinado el perfil de temperatura por el esquema de control, el mismo se puede implementar en forma práctica ajustando la temperatura del medio de enfriamiento.

Por lo anterior, el modelo simplificado usado en el diseño del controlador es el siguiente:

$$\frac{dI}{dt} = -fk_d I \quad (2.18)$$

$$\frac{dM}{dt} = -k_1 M \sqrt{M} \quad (2.19)$$

Capítulo 3

Secuenciamiento de Procesos Lote

En este capítulo se plantea el problema de secuenciamiento considerando los aspectos mencionados en el capítulo anterior, se formula como un problema de optimización y se muestran los resultados de la simulación.

3.1. Secuenciamiento como problema de optimización

El problema de secuenciamiento se formula como un problema de optimización en el cuál usamos dos tipos de variables:

- Variables enteras que son usadas para determinar la mejor secuencia de producción.
- Variables continuas tomadas en cuenta en tiempos de producción, ciclo de producción.

Debido a que los perfiles dinámicos que presentan tanto las variables manipuladas como las variables controladas son también variables de decisión, el problema resultante es un problema de optimización dinámica mixta entera (MIDO).

Para resolver el problema MIDO, uso la metodología de Grossmann y Flores Tlacuahuac [1], la cuál consiste en transformar el problema MIDO en un problema de programación no lineal mixto entero (MINLP) que puede ser resuelto usando métodos estándar. La estrategia consiste en transformar el conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias del modelo en ecuaciones algebraicas.

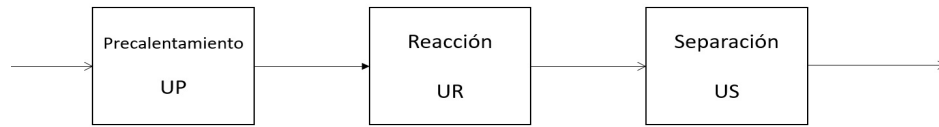


Figura 3.1: Planta multiproducto

3.1.1. Planteamiento

En los procesos lote, un producto es realizado a través de una serie de tareas. Cada tarea es ejecutada en una de las unidades. El tamaño del lote para ejecutar la tarea es fijo.

El problema del secuenciamiento es asignar las tareas a las unidades de procesamiento, determinar la secuencia de ejecución de dichas tareas así como los tiempos de inicio y tiempos finales de ejecución. La ejecución de las tareas es caracterizada por un sistema dinámico [53].

3.1.2. Formulación

Considerando que en una planta multiproducto de polimerización de estireno se producirán cuatro productos ($p1, p2, p3, p4$) como una serie de lotes que consiste de tres unidades de procesamiento en serie: Unidad de Precalentamiento (UP), Unidad de Reacción (UR) y Unidad de Separación (US); ver Figura 3.1. Los tiempos de procesamiento para cada unidad y cada producto se muestran en la Tabla 3.1.

Se asume que no hay almacenamiento intermediario disponible entre unidades de procesamiento, esto es, si termina el procesamiento de un producto en la unidad k y la unidad $k + 1$ no está libre porque todavía está procesando el producto previo, entonces el producto completado debe mantenerse en la unidad k hasta que la unidad $k + 1$ se encuentre libre. Cuando termina el procesamiento de un producto en la última unidad, éste se envía inmediatamente a su almacenamiento. Los tiempos requeridos para transferir un producto de una unidad a otra son despreciables comparados con los tiempos de procesamiento.

El problema consiste en determinar la secuencia de tiempos para producir los cuatro productos minimizando el ciclo de producción (tiempo total de procesamiento de 1 lote de cada producto). Se asume que todas las unidades están inicialmente vacías y que el procesamiento de algún producto puede retrasarse una cantidad de tiempo arbitraria por mantenerse en espera de que se libere alguna unidad.

Sea N el número de productos y M el número de unidades en la planta. Además,

Unidades	Productos			
	$p1$ 30 %	$p2$ 40 %	$p3$ 50 %	$p4$ 60 %
UP	0.5	0.7	0.9	1.0
UR	0.1	1.25	2.4	2.65
US	5.3	4.8	2.5	0.2

Tabla 3.1: Tiempos de procesamiento de productos (h)

$C_{j,k}$ es el tiempo requerido para que el j -ésimo producto deje la unidad k después de completar su procesamiento y sea $\tau_{j,k}$ el tiempo requerido para procesar el j -ésimo producto en la unidad k (ver Tabla 3.1). El primer producto va a la unidad 1 a tiempo cero, $C_{1,0} = 0$. El índice j en $\tau_{j,k}$ y $C_{j,k}$, denota la posición de un producto en la secuencia. Por lo tanto $C_{N,M}$ es el tiempo en el cuál el último producto deja la última unidad y minimiza el ciclo de producción.

A partir de $C_{j,k}$ se derivan tres restricciones. Primero, el j -ésimo producto en la secuencia no puede dejar la unidad k hasta que cumpla su tiempo de procesamiento en dicha unidad, por lo tanto, para que sea procesado en la unidad k , previamente dejó la unidad $k - 1$. Por consiguiente, el tiempo al cuál deja la unidad k ($C_{j,k}$) debe ser mayor o igual al tiempo en que dejó la unidad $k - 1$ más el tiempo de procesamiento en k . La formulación de dicha restricción es la siguiente:

$$C_{j,k} \geq C_{j,k-1} + \tau_{j,k} \quad j = 1, \dots, N \quad k = 2, \dots, M \quad (3.1)$$

Similarmente, el j -ésimo producto no puede dejar la unidad k hasta que el producto $j - 1$ haya sido procesado y transferido:

$$C_{j,k} \geq C_{j-1,k} + \tau_{j,k} \quad j = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, M \quad (3.2)$$

Dónde $C_{0,k} = 0$. Finalmente el j -ésimo producto en la secuencia no puede dejar la unidad k hasta que esté libre la unidad $k + 1$ (por ejemplo, cuando el producto $j - 1$ ha sido transferido). Por lo tanto

$$C_{j,k} \geq C_{j-1,k+1} \quad j = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, M - 1 \quad (3.3)$$

Aunque las ecuaciones (3.1)-(3.3) representan el conjunto completo de restricciones, algunas de ellas son redundantes. De la ecuación (3.1) $C_{j,k} \geq C_{j,k-1} + \tau_{j,k}$ para $k \geq 2$. Pero de la ecuación (3.3), $C_{j,k-1} \geq C_{j-1,k}$, por lo tanto $C_{j,k} \geq C_{j-1,k} + \tau_{j,k}$ para $k = 2$. En esencia, las ecuaciones (3.1) y (3.3) implican las ecuaciones (3.2) para $k = 2$, así que

en las ecuaciones (3.2) para $k = 2$, M es redundante.

Habiendo derivado las restricciones para los tiempos requeridos, el siguiente paso consiste en determinar las restricciones para la secuencia de operaciones. A diferencia de las restricciones anteriores, las variables de decisión aquí son discretas (binarias). Se define $X_{i,j}$ como sigue. $X_{i,j} = 1$ si el producto i (producto con etiqueta pi) está en la posición j de la secuencia, de otro modo es igual a cero. Por lo tanto $X_{3,2} = 1$ significa que el producto $p3$ está en la segunda posición en la secuencia de producción, y $X_{3,2} = 0$ significa que no está en la segunda posición. El conjunto de estas restricciones es:

$$X_{1,j} + X_{2,j} + X_{3,j} + X_{4,j} + \cdots + X_{N,j} = 1 \quad j = 1, \dots, \quad (3.4)$$

Similarmente todos los productos deben ocupar solo una posición en la secuencia:

$$X_{i,1} + X_{i,2} + X_{i,3} + X_{i,4} + \cdots + X_{i,N} = 1 \quad i = 1, \dots, N \quad (3.5)$$

La $X_{i,j}$ que satisface las ecuaciones (3.4) y (3.5) siempre nos dará una secuencia significativa. Ahora determinamos los tiempos requeridos $t_{i,k}$ para un conjunto dado de $X_{i,j}$. Si el producto pi está en la posición j , entonces $t_{i,k}$ debe ser $\tau_{i,k}$, $X_{i,j} = 1$ y $X_{i,1} = X_{i,2} = \cdots = X_{i,j-1} = X_{i,j+1} = \cdots = X_{i,N} = 0$. Por lo tanto podemos usar $X_{i,j}$ para tomar los tiempos de procesamiento correctos representados por $t_{j,k}$ imponiendo la restricción

$$\tau_{j,k} = X_{1,j}t_{1,k} + X_{2,j}t_{2,k} + X_{3,j}t_{3,k} + \cdots + X_{N,j}t_{N,k} \quad j = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, M \quad (3.6)$$

Para reducir el número de restricciones, sustituimos $\tau_{j,k}$ de la ecuación (3.6) dentro de las ecuaciones (3.1) y (3.2) para obtener la formulación siguiente [17].

Minimizar: C_{NM}

Sujeto a: Ecuaciones (3.3), (3.4), (3.5) y

$$C_{i,k} \geq C_{i,k-1} + \sum_{j=1}^N X_{j,i}t_{j,k} \quad i = 1, \dots, N \quad k = 2, \dots, M \quad (3.7)$$

$$C_{i,1} \geq C_{i-1,1} + \sum_{j=1}^N X_{j,i}t_{j,1} \quad i = 1, \dots, N \quad (3.8)$$

Donde $C_{i,k} \geq 0$ y $X_{i,j}$ es una variable binaria.

	UP	UR	US
p1	0.5	0.6	5.9
p4	1.5	5.9	7.15
p2	5.9	7.15	11.95
p3	9.55	11.95	14.45

Tabla 3.2: Tiempos $C_{j,k}$ de la planta multiproducto. 3 Unidades y 4 Productos

3.1.3. Simulación

La formulación anterior involucra variables binarias $X_{i,j}$, variables continuas $C_{i,k}$ y funciones no lineales, por lo tanto es un problema de programación no lineal mixto-entero (MINLP) y puede resolverse usando la herramienta GAMS MIP.

Resolviendo el problema usando la información de la Tabla 3.1 obtenemos $X_{1,1} = X_{2,3} = X_{3,4} = X_{4,2} = 1$. Esto significa que $p1$ está en la primera posición de la secuencia de producción óptima, $p2$ en la tercera, $p3$ en la cuarta y $p4$ en la segunda. En otras palabras, el orden de la secuencia óptima es $p1 - p4 - p2 - p3$. Cabe mencionar que se debe tener especial cuidado al interpretar $C_{i,k}$ a la salida de GAMS, porque $C_{i,k}$ realmente significa el tiempo al cual el j -ésimo producto en la secuencia (y no el producto pi) deja la unidad k . Por consiguiente $C_{2,3} = 7.15$ significa que el segundo producto (en este caso, el $p4$) deja la unidad 3 a las 7.15 horas.

Interpretando de esta forma los resultados obtenidos en la simulación (ver Tabla 3.2), la secuencia de producción correspondiente se muestra en el diagrama de Gantt en la Figura 3.2, el cuál muestra el estatus de las unidades a diferentes tiempos. La UP procesa a $p1$ durante $[0 - 0.5]$ h . Cuando $p1$ deja la UP a $t = 0.5h$ inicia con el procesamiento de $p4$ durante $[0.5 - 1.5]$ h . Después la UP permanece libre hasta las 5.2 h cuando comienza a procesar a $p2$, este tiempo libre existe porque de otro modo la UR no podría procesar inmediatamente a $p2$ ya que en ese instante sigue procesando a $p4$.

La UR procesa a $p1$ de $[0.5 - 0.6]$ h , después hay un tiempo libre de $[0.6 - 1.5]$ h que es el instante en que UP sigue procesando a $p4$, una vez que UP termina con $p4$, éste es enviado a UR por un lapso de 4.4 h , como se observa en el diagrama, UR procesa a $p4$ durante 2.65 h el resto del tiempo permanece en espera ya que no puede ser enviado a US porque en ese instante dicha unidad sigue procesando a $p1$.

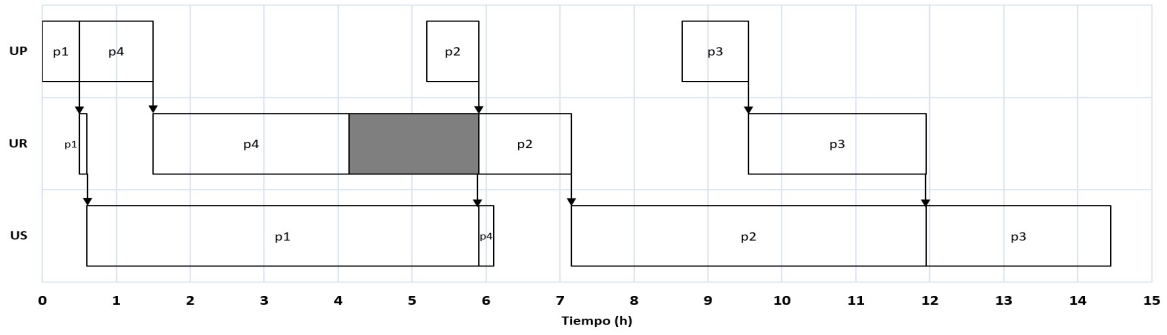


Figura 3.2: Diagrama de Gantt de la secuencia óptima para la planta multiproducto. 3 Unidades y 4 productos.

Es común en las plantas lote tener unidades libres por cierto tiempo o por el contrario unidades que no pueden descargar el producto porque no hay unidades libres. Esto sucede porque los tiempos de procesamiento varían de unidad a unidad y de producto a producto, reduciendo el tiempo de utilización de las unidades en la planta lote.

Los lotes terminados de $p1$, $p4$, $p2$ y $p3$ son completados en los tiempos 5.9 h, 7.15 h, 11.95 h y 14.45 h. El mínimo ciclo de producción es de 14.45 h.

Capítulo 4

Control de Reactores Lote

Este capítulo trata el segundo problema de este trabajo que es el control de reactores lote, implementando la técnica de NMPC para el caso específico de polimerización de estireno, incluye la formulación y resultados de simulación del modelo.

4.1. Seguimiento de trayectoria del proceso de polimerización de estireno

4.1.1. Implementación y formulación de NMPC

Para ayudar a entender las ideas básicas que han sido usadas en el diseño de control predictivo citaré a continuación un ejemplo de aplicación de Liuping Wang [26] sobre las actividades de trabajo que realizamos en nuestro día a día. Nuestro día de trabajo inicia a las 9 en punto de la mañana. Estamos con nuestro equipo de trabajo tratando de completar las tareas de diseño e implementación de un sistema de control predictivo basado en modelos para un recipiente que contiene un líquido. La regla del juego es que nosotros siempre planeamos nuestras actividades para las siguientes 8 horas de trabajo, sin embargo, solo implementamos el plan para la primera hora. Esta actividad de planeación es repetida cada hora hasta completar todas las tareas.

Dada la cantidad de trabajo que tenemos realizada a las 9 de la mañana, planeamos las actividades de trabajo para las siguientes 8 horas. Asumiendo que las tareas de trabajo son divididas en modelado, diseño, simulación e implementación. Nuestro trabajo está en función de varios factores como el empeño que pongamos en realizar las actividades, que tan bien trabaja el equipo y si tendremos ayuda adicional de otras personas. Esas son las variables manipuladas en el problema de planeación de actividades. También, nosotros tenemos limitaciones, tal como nuestra habilidad para entender el

problema de diseño, y si tenemos buenas herramientas como equipo de cómputo y software especializado. Esas son las restricciones duras y suaves en la planeación. Contar con la información previa es fundamental para el trabajo de planeación.

Después de considerar todos los puntos anteriores, determinamos las tareas a realizar para las siguientes 8 horas en función de las variables manipuladas. Entonces calculamos hora por hora que necesitamos hacer para completar las tareas. El resultado de esta planeación nos dá las actividades proyectadas de 9 de la mañana a 5 de la tarde. Entonces empezamos a trabajar en las actividades de la primera hora de nuestro plan. A las 10 de la mañana, checamos cuánto tenemos hecho para la primera hora. Esta información es usada para la planeación de nuestra siguiente fase de actividades. Quizá tenemos hecho menos de lo planeado porque no obtuvimos el modelo correcto o porque un compañero de trabajo tuvo que retirarse de emergencia. A pesar de eso, a las 10 de la mañana, hacemos una evaluación que cuánto tenemos logrado, y usamos esta información actualizada para planear las actividades de las siguientes 8 horas. Nuestro objetivo puede ser el mismo o puede cambiar. La longitud de tiempo de la planeación permanece constante (8 horas). Repetimos el mismo proceso de planeación que hicimos a las 9 considerando las variables manipuladas y restricciones además de la información actual respecto al avance de actividades. Este proceso de planeación e implementación es repetido cada hora hasta lograr el objetivo original.

Hay tres elementos clave que se requieren en la planeación. El primero es el modelo de predicción; el segundo es el instrumento de evaluación de nuestras actividades actuales (medición); y el tercero es el instrumento de implementación de las actividades planeadas (realización de control). Los problemas clave en el ejercicio de planeación son:

1. La ventana de tiempo se fija a 8 horas;
2. Necesitamos saber nuestro estatus actual antes de hacer la planeación;
3. Tomamos el mejor enfoque de trabajo para las 8 horas considerando las restricciones, y la optimización se desarrolla en tiempo real con una ventana de tiempo en movimiento y con la última información disponible.

La idea básica detrás del NMPC se muestra en la Figura 4.1. A cada paso de tiempo k , se resuelve un problema de optimización como se ilustra en la parte superior de la figura. Se minimiza una función objetivo (usualmente cuadrática) basada en las predicciones de salida sobre un horizonte de predicción de P pasos de tiempo por una selección de variables manipuladas moviéndose sobre un horizonte de control de M movimientos

de control. Aunque los M movimientos son optimizados, solo se implementa el primero. Después de que u_k es implementado, al siguiente paso de tiempo se obtiene la medición y_{k+1} , como se muestra en la mitad inferior de la figura. Se desarrolla entonces una corrección de error al modelo, debido a que la medición a la salida y_{k+1} , en general, no será igual al valor del modelo predicho. Por tanto un nuevo problema de optimización se resolverá otra vez sobre un horizonte de predicción de P pasos, ajustandose a M movimientos de control. Esta técnica también es conocida como control de horizonte en movimiento [51].

Esta técnica de control además de manejar las restricciones inherentes dadas por la naturaleza física del proceso y aprovechar toda la información que pueda proporcionársele también puede manejar no linealidades del sistema dependiendo del modelo utilizado.

Control Predictivo basado en modelos no lineales (NMPC)

Suponiendo un proceso controlado en el cual el estado $x(n)$ es medido a instantes de tiempo discreto t_n , $n = 0, 1, 2, \dots$. "Controlado" significa que a cada instante de tiempo se puede seleccionar una entrada de control $u(n)$ que influya en el comportamiento futuro del estado del sistema.

En control de seguimiento de trayectorias, la tarea es determinar las entradas de control $u(n)$ tal que $x(n)$ sigan una referencia dada $x^{ref}(n)$ lo más cercano posible. Esto significa que si el estado actual está lejos de la referencia, entonces queremos llevar al sistema hacia la referencia y si el estado actual está cerca de la referencia, entonces queremos que el sistema se mantenga ahí.

Considerando una referencia constante e igual a $x_* = 0$, por ejemplo, $x^{ref}(n) = x_* = 0$ para todo $n \geq 0$. Si se pretende reaccionar a la desviación actual de $x(n)$ del valor de referencia $x_* = 0$, lo más conveniente es retroalimentar a $u(n)$ en la forma $\mu(x(n))$, de tal forma que el estado x estará dentro del conjunto U de valores de control [22].

La idea de control predictivo basado en modelos lineal o no lineal es utilizar un modelo del proceso para predecir y optimizar el comportamiento futuro del sistema. Modelos de la forma:

$$x^+ = f(x, u) \quad (4.1)$$

Donde se asigna a un estado x y a un valor de control u el estado sucesor x^+ al siguiente instante de tiempo. Comenzando del estado actual $x(n)$, para una secuencia de control dada $u(0), \dots, u(N-1)$ con horizonte de longitud $N \geq 2$. Iterando (4.1) se

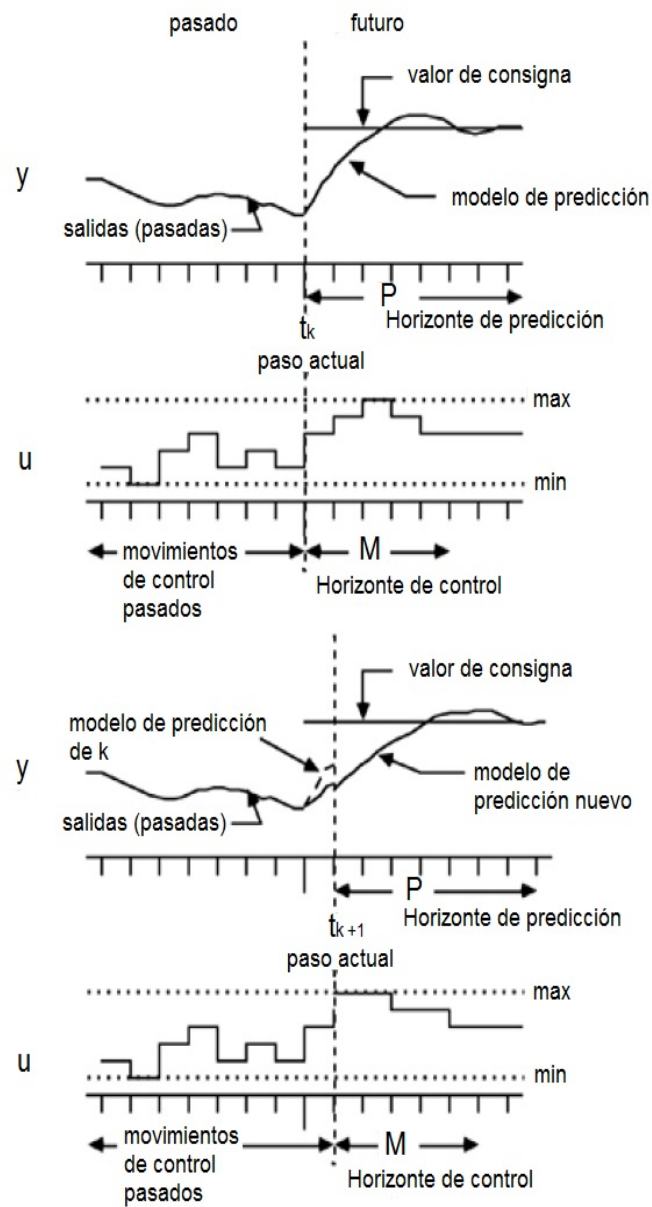


Figura 4.1: Concepto básico de NMPC [51].

construye una trayectoria de predicción x_u definida por

$$x_u(0) = x(n), \quad x_u(k+1) = f(x_u(k), u(k)), \quad k = 0, \dots, N-1 \quad (4.2)$$

Procediendo de esta forma, se obtienen predicciones $x_u(k)$ para el estado del sistema $x(n+k)$ al tiempo t_{n+k} en el futuro. Por lo tanto se obtiene una predicción del comportamiento del sistema en el intervalo discreto t_n, \dots, t_{n+N} dependiendo de la secuencia de control que se haya escogido $u(0), \dots, u(N-1)$.

Ahora se usa el control óptimo para determinar la secuencia $u(0), \dots, u(N-1)$ tal que x_u esté lo más cerca posible de $x_* = 0$. Para hacer esto se mide la distancia entre $x_u(k)$ y $x_* = 0$ para $k = 0, \dots, N-1$ por una función $\ell(x_u(k), u(k))$. No solo se permite penalizar la desviación del estado a la referencia, si se desea también se puede penalizar la distancia de los valores de control $u(k)$ al control de referencia u_* . Una elección común para este propósito es la función cuadrática:

$$\ell(x_u(k), u(k)) = \|x_u(k)\|^2 + \lambda \|u(k)\|^2$$

Donde $\|\cdot\|$ denota la norma y $\lambda \geq 0$ es un parámetro de peso para el control, el cual puede escogerse como 0 si no se desea penalizar. El problema de control óptimo sería:

$$\text{minimize } J(x(n), u(\cdot)) := \sum_{k=0}^{N-1} \ell(x_u(k), u(k))$$

Asumiendo que este problema de control óptimo tiene una solución dada por la mínima secuencia de control $u^*(0), \dots, u^*(N-1)$. El problema quedaría:

$$\min_{u(0), \dots, u(N-1)} J(x(n), u(\cdot)) = \sum_{k=0}^{N-1} \ell(x_{u^*}(k), u^*(k))$$

Para obtener el valor deseado de $\mu(x(n))$, fijamos $\mu(x(n)) := u^*(0)$ y aplicamos el primer elemento de la secuencia de control óptima. Este procedimiento se muestra en la Figura 4.2.

Para los siguientes instantes de tiempo t_{n+1}, t_{n+2}, \dots se repite el procedimiento con los nuevos valores medidos $x(n+1), x(n+2), \dots$ para obtener los valores retroalimentados $\mu(x(n+1)), \mu(x(n+2)), \dots$. En resumen, se obtiene la ley de retroalimentación μ por una *optimización en línea iterativa* sobre las predicciones generadas por el modelo (4.1) [22]. Esta es la primera característica clave del control predictivo basado en

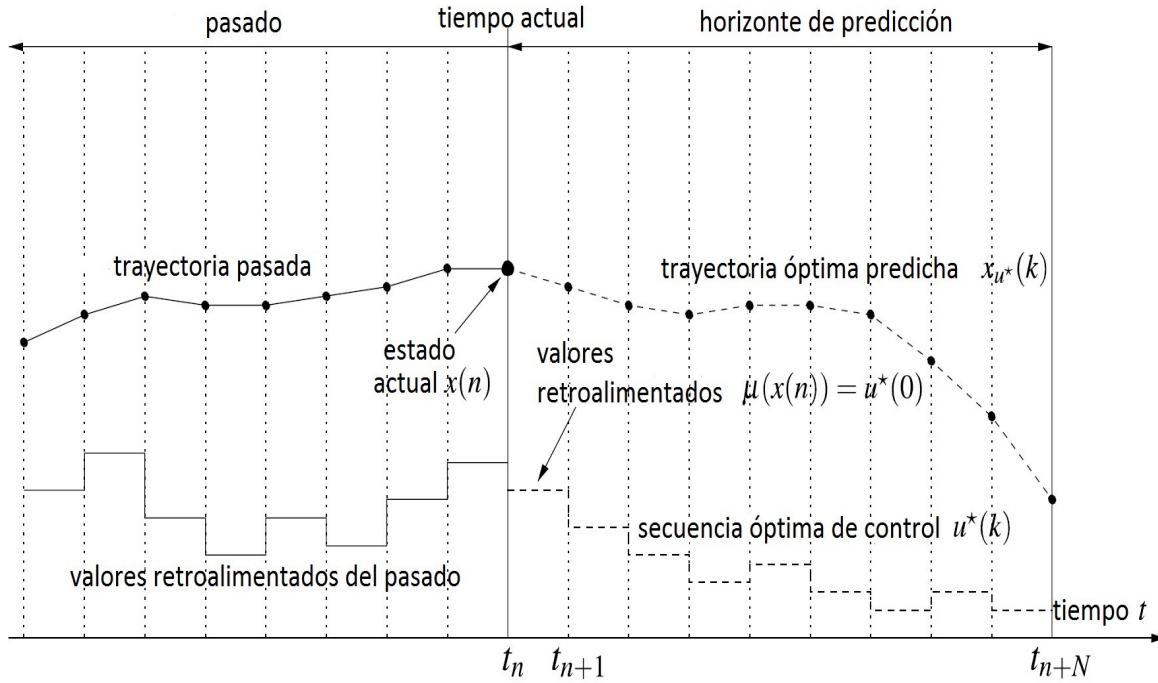


Figura 4.2: Ilustración del NMPC [22]

modelos.

Desde el punto de vista del horizonte de control, procediendo iterativamente las trayectorias $x_u(k)$, $k = 0, \dots, N$ proporcionan una predicción sobre el intervalo discreto t_n, \dots, t_{n+N} al tiempo t_n , sobre el intervalo $t_{n+1}, \dots, t_{n+N+1}$ al tiempo t_{n+1} , sobre el intervalo $t_{n+2}, \dots, t_{n+N+2}$ al tiempo t_{n+2} , etc.

Por lo tanto, el horizonte de predicción se va moviendo, este *horizonte en movimiento* es la segunda característica clave del control predictivo basado en modelos. El término adicional *no lineales* indica que nuestro modelo (4.1) no necesita ser linealizado para aplicar dicha técnica.

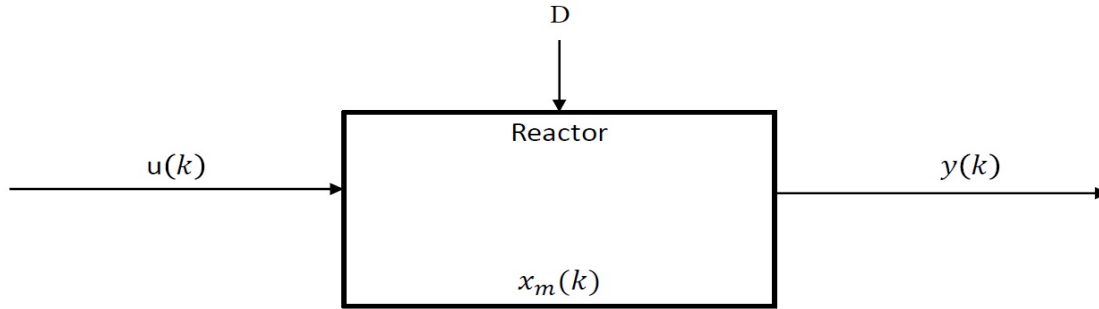


Figura 4.3: Reactor lote. Sistema SISO

4.1.2. Planteamiento de NMPC

En Figura 4.3 muestro el planteamiento del MPC en un reactor lote. En este reactor se está llevando a cabo la polimerización de estireno. La variable de entrada o variable manipulada es $u(k)$, la variable de salida o variable de control es $y(k)$, las variables de estado son $x_m(k)$ y D son las perturbaciones o ruido del sistema que en nuestro caso serán igual a cero.

Esta planta es un sistema de una sola entrada y una sola salida (SISO), sin embargo el problema puede expandirse a sistemas de múltiples entradas y múltiples salidas (MIMO).

4.1.3. Simulación

Considerando la información anterior, se realizaron simulaciones de NMPC para el reactor lote mostrado en la Figura 4.3 usando el modelo descrito en la Sección 2.3.1 de este trabajo constituido por las ecuaciones (2.18) y (2.19).

Además de los parámetros cinéticos y físicos mostrados en la Tabla 2.1, se consideraron los parámetros de simulación NMPC indicados en la Tabla 4.1 y las cotas mostradas en la Tabla 4.2.

Los resultados de simulación están enfocados a obtener cuatro conversiones distintas de polímero (30 %, 40 %, 50 % y 60 %). La Figura 4.4 muestra las trayectorias de concentración de monómero (M), iniciador (I) y entrada de control (u) para alcanzar una conversión del 30 %. Cabe mencionar que la conversión de monómero está definida por (2.17). Se observa que la conversión se alcanza a los 6 min de reacción con dos entradas de control: subir la temperatura del reactor a 413.4 K y después bajarla a 280 K.

Horizonte de predicción	80
Horizonte de control	3
Factor de peso	0
Ruido	0
Número de elementos finitos	80
Número de puntos de colocación	3
Tiempo de muestreo	0.05

Tabla 4.1: Parámetros de simulación NMPC.

Mínima I	0.0001	Máxima I	0.02
Mínima M	0.0001	Máxima M	7.0
Mínima u	280	Máxima u	420

Tabla 4.2: Cotas para I , M y u .

La Figura 4.5 muestra las trayectorias para una conversión de 40 %. Se observa que dicha conversión se alcanza en 1.25 horas subiendo la temperatura del reactor a 415 K y disminuyéndola paulatinamente hasta 339 K .

En la Figura 4.6 se observa que la conversión de 50 % se alcanza en 2.4 h consumiendo casi todo el iniciador llegando a una temperatura de 334.5 K . El último producto se consigue con una conversión de 60 %, las trayectorias se muestran en la Figura 4.7, se necesitan 2.7 horas y prácticamente todo el iniciador.

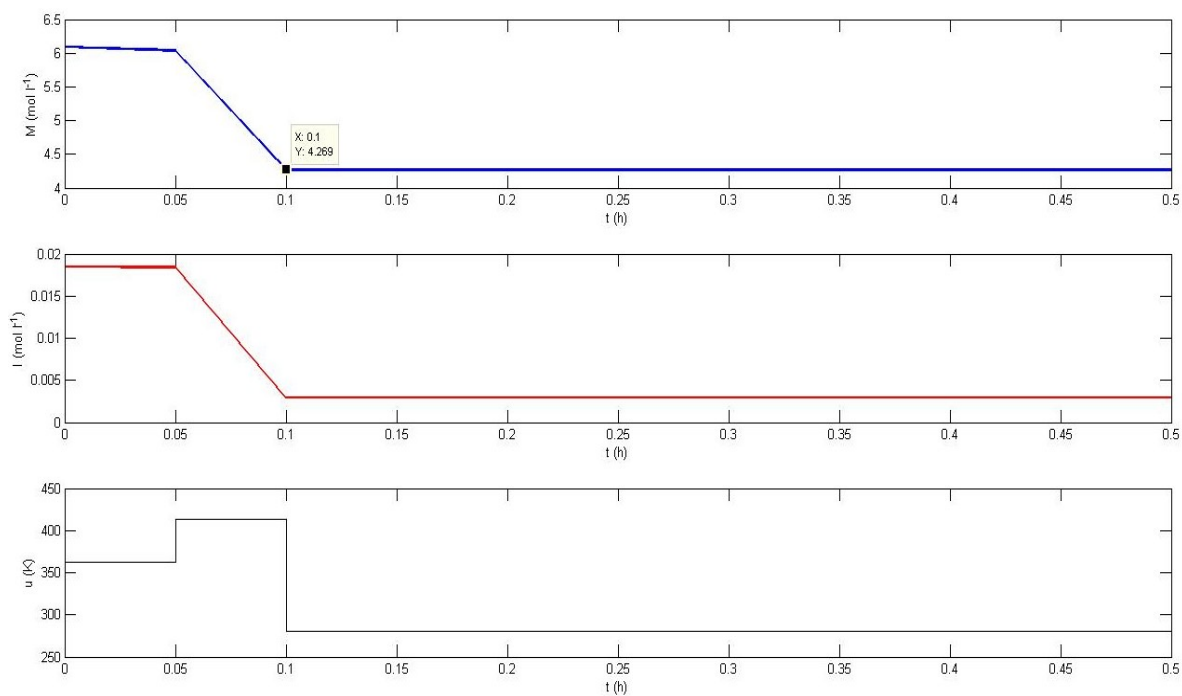


Figura 4.4: Simulación NMPC para conversión del 30 %

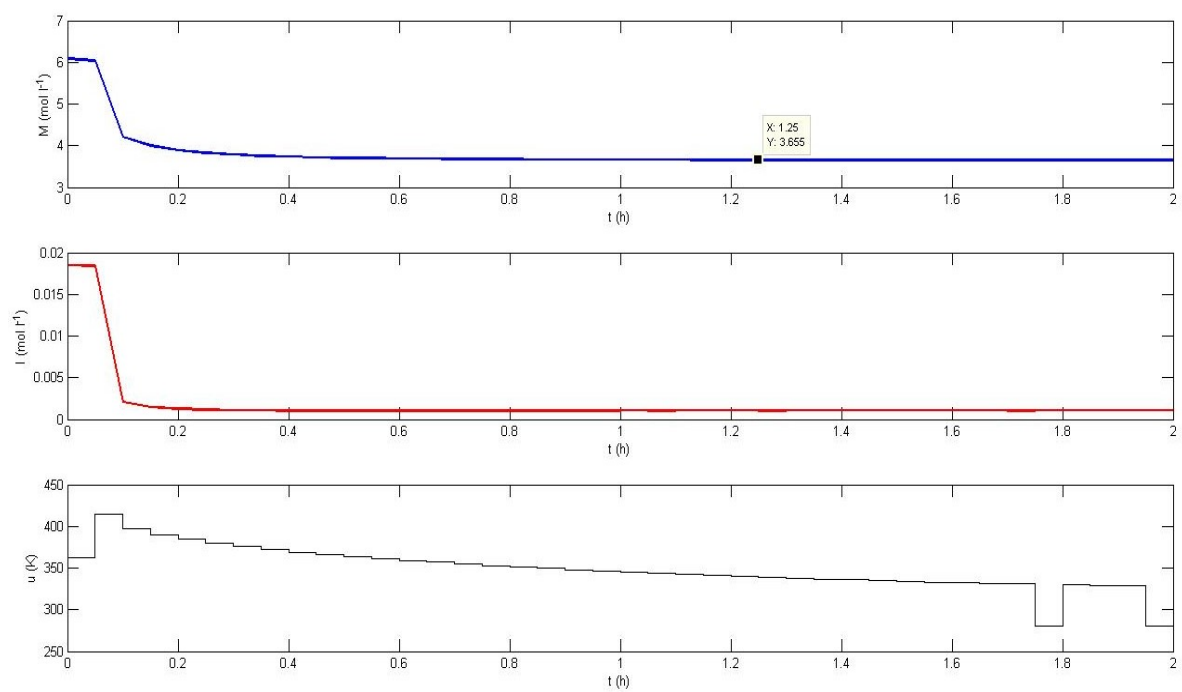


Figura 4.5: Simulación NMPC para conversión del 40 %

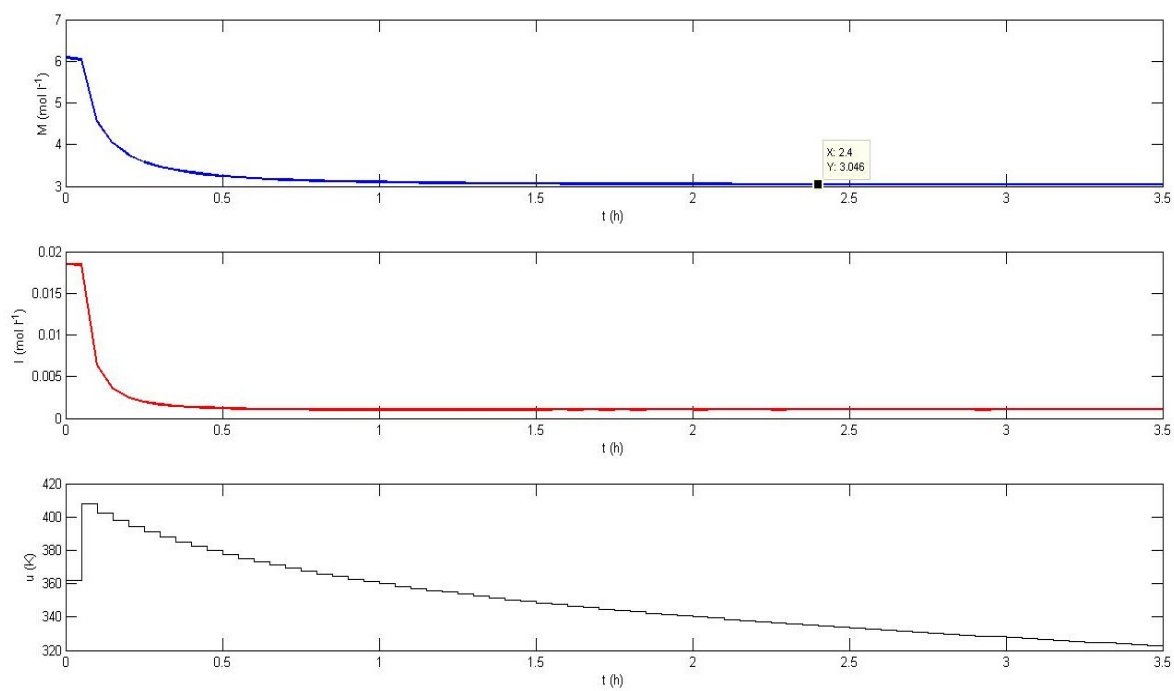


Figura 4.6: Simulación NMPC para conversión del 50 %

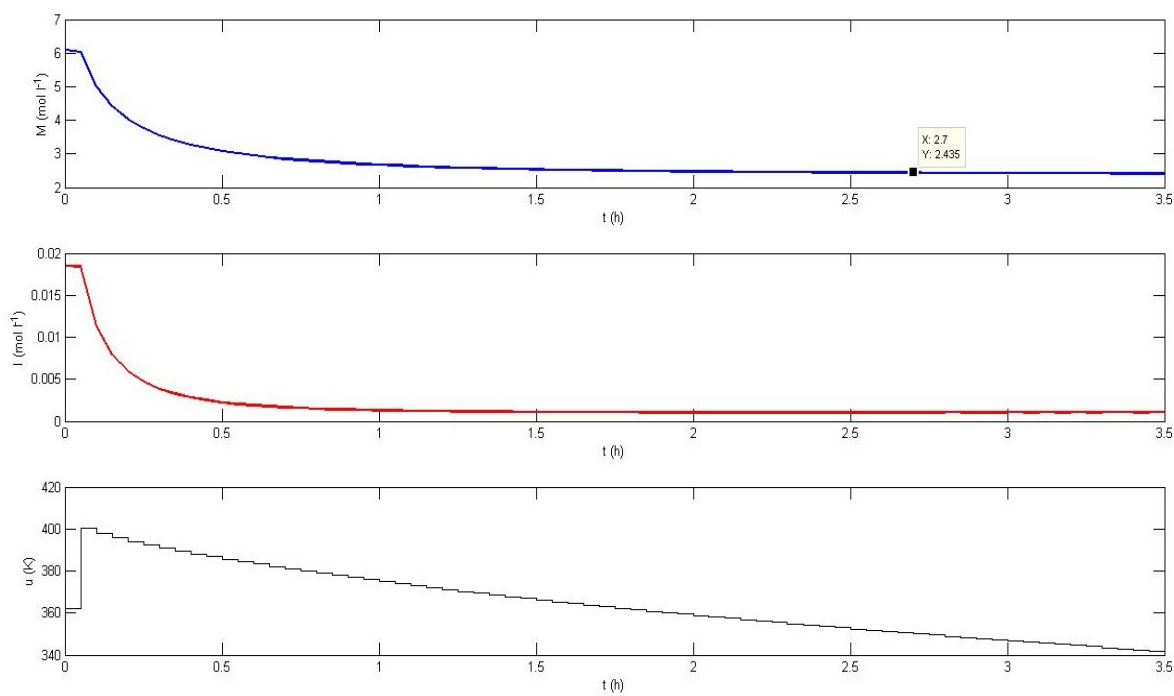


Figura 4.7: Simulación NMPC para conversión del 60 %

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. Conclusiones principales

En este trabajo se estudio el problema general de secuenciamiento y el control predictivo basado en modelos no lineales de procesos lote. Los resultados principales son los siguientes:

1. Relevancia de los procesos lote en procesos industriales:
 - a)* La producción se lleva a cabo en equipos relativamente estandarizados que pueden ser adaptados fácilmente y si es necesario reconfigurados para producir productos diferentes.
 - b)* Cada lote necesita ser procesado siguiendo una secuencia de etapas definida.
 - c)* Pueden absorber cambios rápidos en la demanda de los productos.
2. Secuenciamiento de procesos lote. El problema general de secuenciamiento de procesos lote consiste en:
 - a)* Asignar las tareas a las unidades de procesamiento.
 - b)* Determinar la secuencia de ejecución de dichas tareas así como los tiempos de inicio y tiempos finales de ejecución.
 - c)* Minimizar el ciclo de producción.

El problema de secuenciamiento se resolvió usando la metodología de Grossmann y Flores Tlacuahuac [1], para el caso de cuatro productos A, B, C, D (polímeros con conversiones 30, 40, 50 y 60 % respectivamente) y tres unidades de procesamiento (UP,UR

y US) se obtuvo la siguiente secuencia óptima de producción: A-D-B-C. Cabe mencionar que esta secuencia se repite cíclicamente hasta completar una demanda deseada de lotes.

Considerando los tiempos de procesamiento en cada unidad se obtuvo que un ciclo de producción se completa en 14.45 horas. Se utilizó la técnica de programación mixta-entera (MIP), solver CPLEX y la herramienta (software) GAMS versión 23.3.3.

3. Control predictivo basado en modelos no lineales (NMPC). El NMPC consiste en tres etapas:

- a) Discretización del modelo de proceso.
- b) Definición del horizonte de predicción.
- c) Optimización en línea iterativa.

El problema de NMPC se resolvió usando la metodología de Gutierrez Limon y Flores Tlacuahuac [3], se simuló la obtención de los cuatro productos A, B, C y D controlando la concentración de monómero (M) y manipulando la temperatura del reactor (u). El modelo usado es de Özkan y colaboradores [18] del cuál solo se toman las ecuaciones de balance de materia para el monómero e iniciador con el fin de simplificar el diseño del controlador.

El controlador incluye la discretización del modelo usando la técnica de colocación ortogonal sobre elementos finitos con 80 elementos finitos y 3 puntos de colocación. Se resolvió una función objetivo cuadrática que minimiza la diferencia entre la variable controlada y el set point.

4. Secuenciamiento y control de procesos lote. Las ideas presentadas en este trabajo tienen como finalidad establecer las bases para integrar el secuenciamiento y control de procesos lote. Desde ese punto de vista la técnica de NMPC se considera un paso natural para la integración con la técnica de secuenciamiento que se presenta en este trabajo.

5.2. Trabajo futuro

Derivado de la investigación y resultados encontrados en este trabajo, se pueden establecer las siguientes líneas de investigación abiertas:

1. Integración del secuenciamiento y control de procesos.
2. Aplicación de otras técnicas de control a procesos lote, por ejemplo control de modo deslizante.
3. Estudiar el problema simultáneo de planeación, secuenciamiento, y control.

Bibliografía

- [1] Flores Tlacuahuac A. y Grossmann I.E. Simultaneous cyclic scheduling and control of a multiproduct CSTR. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45:6698–6712, 2006.
- [2] Grancharova A. y Johansen T. A. *Explicit Nonlinear Model Predictive Control Theory and Applications*. Springer, 2012.
- [3] Gutierrez Limon M. A. y Flores Tlacuahuac A. A scheduling and nonlinear model predictive control strategy for continuous polymerization reactors. *Macromolecular Reaction Engineering*, 10.1002/mren.201300141:1–11, 2013.
- [4] Hosen M. A., Hussain M. A., Mjalli F. S., Khosravi A., Creighton D., y Naha-vandi S. Performance analysis of three advanced controllers for polymerization batch reactor: An experimental investigation. *Chemical Engineering Research and Design*, 92:903–916, 2014.
- [5] Krishnan A. y Kosanovich K. A. Production scheduling of single-stage multi-product batch chemical processes with fixed batch sizes. *Chemical Engineering Research and Design*, 76:806–815, 1998.
- [6] Méndez C. A., Cerdá J., Grossmann I. E., Harjunkski I., y Fahl M. State-of-the-art review of optimization methods for short-term scheduling of batch processes. *Computers and Chemical Engineering*, 30:913–946, 2006.
- [7] Cruz Jiménez B., L. Castellanos R., Escamilla Puc A., y Catzín Contreras A. Control por linealización de un reactor de polimerización. *Ingeniería. Revista Académica de la FI-UADY*, 15-2:111–128, 2011.
- [8] Stankovic B. y Bakic V. Scheduling of batch operations-model based optimization approach. *Mechanical Engineering*, 4:83–92, 2006.
- [9] Suvire R. B., Scaglia G. J., Serrano M. E., Vega J. E., y Ortiz O. A.

-
- [10] Zhang B. y Epstein D. J. *A Fuzzy-Logic-Based Methodology for Batch Process Scheduling*, 2007.
- [11] Ferris M. C., Sundaramoorthy A., y Maravelias C. T. *Simultaneous Batching and Scheduling Using Dynamic Decomposition on a Grid*, 2007.
- [12] Kravaris C., Wright R. A., y Carrier J. F. Nonlinear controllers for trajectory tracking in batch processes. *Computers and Chemical Engineering*, 13:73–82, 1989.
- [13] Christofides P. D., Scattolini R., Muñoz De la Peña D., y Liu J. Distributed model predictive control: A tutorial review and future research directions. *Computers and Chemical Engineering*, 51:21–41, 2013.
- [14] Laurí D., Lennox B., y Camacho J. Model predictive control for batch processes: Ensuring validity of predictions. *Journal of Process Control*, 24:239–249, 2014.
- [15] Silva D. y Oliveira N. Optimization and nonlinear model predictive control of batch polymerization systems. *Computers and Chemical Engineering*, 26:649–658, 2002.
- [16] Ekpo E. E. y Mujtaba I. M. Evaluation of neural networks-based controllers in batch polymerization of methyl methacrylate. *Neurocomputing*, 71:1401–1412, 2008.
- [17] Thomas F. E., Himmelblau D. M., y Lasdon L. S. *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill Chemical Engineering Series, 2001.
- [18] Özkan G., Albaz M., y Hapoglu H. Generalized predictive control of optimal temperature profiles in a polystyrene polymerization reactor. *Chemical Engineering and Processing*, 37:125–139, 1998.
- [19] Bouhenchir H., Cabassud M., y Le Lann M.V. Predictive functional control for the temperature control of a chemical batch reactor. *Computers and Chemical Engineering*, 30:1141–1154, 2006.
- [20] Yu H. y Flores Cerrillo J. Latent variable model predictive control for trajectory tracking in batch processes: Internal model control interpretation and design methodology. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52:12437–12450, 2013.
- [21] Flores Cerrillo J. y MacGregor J. F. Latent variable MPC for trajectory tracking in batch processes. *Journal of Process Control*, 15:651–663, 2005.

-
- [22] Grüne L. and Pannek J. *Nonlinear Model Predictive Control Theory and Algorithms*. Springer, 2011.
- [23] Scenna N. J. *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*. ISBN: 950-42-0022-2-1999, 1999.
- [24] Zhuge J. y Ierapetritou M. G. Integration of scheduling and control for batch processes using multi-parametric model predictive control. *AIChE Journal*, 60:3169–3183, 2014.
- [25] Biegler L., Grossmann I. E., y Westerberg A. *Systematic Methods of Chemical Process Design*. Prentice Hall, 1997.
- [26] Wang L. *Model Predictive Control System Design and Implementation Using MATLAB*. Springer, 2009.
- [27] Abbaszadeh M. y Solgi R. Constrained nonlinear model predictive control of a polymerization process via evolutionary optimization. *Journal of Intelligent Learning Systems and Applications*, 6:35–44, 2014.
- [28] Ahn S. M., Chang S. C., y Rhee H. K. Application of optimal temperature trajectory to batch PMMA polymerization reactor. *Journal of Applied Polymer Science*, 69:59–68, 1998.
- [29] Castro P. M., Erdirik Dogan M., y Grossmann I. E. Simultaneous batching and scheduling of single stage batch plants with parallel units. *AIChE Journal*, 54:183–193, 2007.
- [30] Dessouky M. M. y Kijowski B. A. Production scheduling of single-stage multi-product batch chemical processes with fixed batch sizes. *IEEE Transactions*, 29:399–408, 1997.
- [31] Golshan M., MacGregor J. F., Bruwer M. J., y Mhaskar P. Latent variable MPC for trajectory tracking in batch processes: Role of the model structure. En *American Control Conference*. 2009.
- [32] Golshan M., MacGregor J. F., Bruwer M. J., y Mhaskar P. Latent variable model predictive control (LV-MPC) for trajectory tracking in batch processes. *Journal of Process Control*, 20:538–550, 2010.

-
- [33] Golshan M., MacGregor J. F., y Mhaskar P. Latent variable model predictive control for trajectory tracking in batch processes: Alternative modeling approaches. *Journal of Process Control*, 21:1345–1358, 2011.
- [34] Goshan M. y MacGregor J. F. Identification for the control of variable trajectories in batch processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52:2352–2367, 2013.
- [35] Huzmezan M., Gough B., y Kovac S. Advanced control of batch reactor temperature. En *World Batch Forum North American Conference*. 2002.
- [36] Soroush M. y Kravaris C. Optimal design and operation of batch reactors. 2. a case study. *Industrial Engineering Chemical Research*, 32:882–893, 1993.
- [37] Zavala V. M., Flores Tlacuahuac A., y Vivaldo Lima E. Dynamic optimization of a semi-batch reactor for polyurethane production. *Chemical Engineering Science*, 60:3061–3079, 2005.
- [38] Daoutidis P., Soroush M., y Kravaris C. Feedforward/feedback control of multi-variable nonlinear processes. *AIChE Journal*, 36:1471–1484, 1990.
- [39] Brásio A. S. R., Romanenko A., Leal J., Santos L. O., y Fernandes N. Nonlinear model predictive control of biodiesel production via transesterification of used vegetable oils. *Journal of Process Control*, 23:1471–1479, 2013.
- [40] Ramirez V. R. y Diwekar U. Stochastic maximum principle for optimal control under uncertainty. *Computers and Chemical Engineering*, 2004.
- [41] Chang J. S., Hsu J. S., y Sung Y. T. Trajectory tracking of an optimizing path in a batch reactor: Experimental study. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 35:2247–2260, 1996.
- [42] Erdogan S., Alpbaz M., y Karaguz A. R. The effect of operational conditions on the performance of batch polymerization reactor control. *Chemical Engineering Journal*, 86:259–268, 2002.
- [43] Lucía S., Finkler T., y Engell S. Multi-stage nonlinear model predictive control applied to a semi-batch polymerization reactor under uncertainty. *Journal of Process Control*, 23:1306–1319, 2013.

-
- [44] Sundaram B. S., Upreti S. R., y Lohi A. Optimal control of batch MMA polymerization with specified time, monomer conversion, and average polymer molecular weights. *Macromolecular Theory and Simulations*, 14:374–386, 2005.
- [45] Terrazas Moreno S. y Flores Tlacuahuac A. Simultaneous cyclic scheduling and optimal control of polymerization reactors. *AIChE Journal*, 53:2301–2315, 2007.
- [46] Benavides P. T. y Diwekar U. Optimal control of biodiesel production in a batch reactor part i: Deterministic control. *FUEL*, 94:211–217, 2012.
- [47] Benavides P. T. y Diwekar U. Studying various optimal control problems in biodiesel production in a batch reactor under uncertainty. *FUEL*, 103:585–592, 2013.
- [48] Peterson T., Hernández E., Arkun Y., y Schork F. J. A nonlinear DMC algorithm and its application to a semibatch polymerization reactor. *Chemical Engineering Science*, 47:737–753, 1992.
- [49] Sampath V., Palanki S., Cockburn J. C., y Corriou J. P. Robust controller design for temperature tracking problems in jacketed batch reactors. *Journal of Process Control*, 12:27–38, 2002.
- [50] Bequette B. W. Nonlinear control of chemical processes: A review. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 30:1391–1413, 1991.
- [51] Bequette B. W. *Process Control Modeling, Design and Simulation*. Prentice Hall PTR, 2002.
- [52] Chu Y. y You F. Efficient decomposition method for integrating production sequencing and dynamic optimization for a multi-product CSTR. *Chemical Engineering Transactions*, 39:715–720, 2014.
- [53] Chu Y. y You F. Integrated planning, scheduling and dynamic optimization for batch processes: MINLP model formulation and efficient solution methods via surrogate modeling. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, págs. 1–48, 2014.
- [54] Nie Y., Biegler L. T., Villa C. M., y Wassick J. M. Discrete time formulation for the integration of scheduling and dynamic optimization. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 54:4303–4315, 2015.